

УДК 004.02

Васильченко Я.А.

студент

james_dean88@mail.ua

Манко Г.І.

*к.т.н., доц. кафедри комп'ютерно-інтегрованих технологій та метрології
ДВНЗ «Український державний хіміко-технологічний університет»*

м. Дніпро, Україна

bsoft@a-teleport.com

ПОБУДОВА ТА ДОСЛІДЖЕННЯ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ ВИРОБНИЦТВА АЗОТНОЇ КИСЛОТИ

Азотна кислота (АК) по обсягу виробництва займає одне з пріоритетних місць серед інших хімічних речовин в Україні та світі. Основна кількість виробленої азотної кислоти використовується на виробництво азотних солей (нітратів) та складних мінеральних добрив. Значна кількість АК переробляється в технічні нітрати. Азотиста кислота та рідкий чотириокис азоту використовується як окиснювач у ракетній техніці. Концентрована АК також використовується для виробництва вибухових речовин, наприклад тротилу та нітрогліцерину.

Значна кількість АК використовується для отримання нітропохідних бензолу, нафталіну, антрацену та інших сполук ароматичного ряду, використовуваних в якості напівпродуктів у виробництві синтетичних барвників, а також у фармацевтичній промисловості.

Найпоширенішим методом виробництва АК є контактне окиснення аміаку до оксиду азоту на платинових каталізаторах при атмосферному тиску.

Відомо [1], що для оптимального управління виробництвом неконцентрованої азотної кислоти потрібно рішення наступних завдань :

- формалізація постановки завдання оптимального управління виробництвом;
- побудова кінетичних моделей реакцій;
- розробка математичної моделі процесу, придатної для цілей управління;
- створення алгоритмів і методів розрахунку на основі використання математичних моделей;
- забезпечення сумісності моделей промислової і екологічної підсистем з урахуванням імовірнісних чинників і обмежень, діючих на технологічні і "екологічні" змінні.

У цій же роботі запропоновані рішення перших двох завдань. Що стосується розробки математичних моделей процесів і апаратів виробництва АК, то пропоновані моделі побудовані зі значними спрощеннями і допущеннями.

Таким недолікам притаманні і праці інших дослідників у галузі моделювання виробництва АК. В основній масі сучасних робіт на цю тему, при розробці математичних моделей нехтують часткою реакцій, вклад у процес яких вважається незначним, або відсутні їх кінетичні дані.

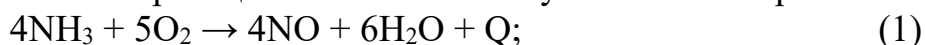
Як показано в [2], наукові основи здійснення окислення аміаку недостатньо висвітлені в літературі. Зокрема, відсутня адекватна промисловим умовам математична модель процесу окислення аміаку на платиноїдному каталізаторі у вигляді тканних або перспективніших в'язаних сіток. Не вирішено завдання моделювання процесу окислення аміаку на блоковому оксидному каталізаторі. Не розкриті особливості впливу структури регулярного шару на роботу платиноїдних сіток. Цільова реакція окислення аміаку до оксиду азоту супроводжується побічними реакціями, що протікають на обох східцях каталітичної системи, у тому числі за участю уловлюючих сіток. Відсутні дані, що дозволяють виявити і кількісно оцінити їх вклад в зниження селективності процесу. Відсутність адекватного математичного опису і недоостатність повномасштабних випробувань в режимі, наближеному до промислових умов, не дозволяє проводити надійні розрахунки промислових реакторів.

У результаті досліджень процесів виробництва слабкої АК нами були розроблені математичні моделі ряду апаратів виробництва: контактного апарату, котла-утилізатора, окиснювача і підігрівача повітря.

Зокрема розроблена і досліджена математична модель контактного апарату окислення аміаку на платиновому каталізаторі, побудована з використанням наступних допущень:

- усі ділянки вільної поверхні каталізатора вважати однаково доступними у дифузійному відношенні, тобто поверхня каталізатора рівнодоступна;
- враховуючи велику швидкість окислення NH_3 на поверхні каталізаторних сіток, внутрішньодифузійне гальмування процесу відсутнє;
- каталізаторний шар є квазігомогенним;
- процес окислення NH_3 є адіабатичним;
- в апараті протікають наступні реакції:

а) гетерогенно-каталітична реакція окислення аміаку киснем повітря



б) гомогенна реакція де фіксації азоту



Контактний апарат являє собою вертикальний циліндр, всередині якого розміщений направляючий конус, встановлений на касету з каталізаторними сітками. Касета опирається на колосники, укладені на корзину з керамічними кільцями Рашига. Аміачно-повітряна суміш (АПС) подається в апарат зверху.

Математична модель контактного апарату включає рівняння матеріального і теплового балансу, які дозволяють розрахувати температуру контактування. Це в свою чергу дає можливість розрахувати ступінь конверсії на кожній каталізаторній сітці. Розрахунок ведеться методом «від сітки до сітки».

Математична модель, реалізована у середовищі MATLAB, перевірена на відповідність даним експериментальних досліджень в ході комп'ютерного експерименту. Перевірка моделі велась по величині ступеня конверсії та температурі нітрозних газів, шляхом порівняння їх розрахункових та експериментальних даних. Порівнювались значення степені конверсії α , отримані лабораторним шляхом і розраховані по моделі. Виявлено, що відхилення цих значень не перевищують межу похибки лабораторного визначення α .

Методом імітаційного моделювання з використанням отриманої моделі були досліджені залежність степені конверсії від температури АПС, тиску, навантаження на апарат, процентного вмісту аміаку у АПС. Були отримані деякі цікаві закономірності. Виявлено, що підігрів АПС на вході у контактний апарат знижує ступінь конверсії аміаку. Тобто необхідність підігріву АПС відпадає, що дозволяє знизити енергетичні витрати.

Математичні моделі котла-утилізатора, окиснювача і підігрівача повітря будувались на основі ідентичних нелінійних диференціальних рівнянь. Суттєвою особливістю процесів теплообміну у цих апаратах є наявність достатньо товстих стінок, тож на перехідний процес теплообміну впливають теплоємності внутрішніх і зовнішніх стінок, а також перехідні процеси розповсюдження тепла в масивних стінках. Крім того, треба враховувати подовжнє переміщення середовищ, що рухаються в апараті, внаслідок турбулізації.

Комп'ютерна реалізація таких математичних моделей здійснюється за допомогою пакетів Statistics and Machine Learning Toolbox і Partial Differential Equation Toolbox середовища MATLAB.

Використання розроблених моделей дозволить вирішувати різні задачі підвищення ефективності виробництва слабкої азотної кислоти, наприклад, задачі оптимізації технологічних режимів, що забезпечують зменшення як енергетичних витрат, так і втрат платини, задачі дослідження і розрахунку ряду пристроїв, задач автоматизації управління технологічними процесами.

Список літератури:

1. Зубаков, А.П. Математическое моделирование и оптимальное управление природо-промышленными системами / А.П. Зубаков // Вестник ТГУ. – 2009. – Т 14. – Вып. 5. – С. 1027–1032.
2. Головня, Е.В. Окисление аммиака на платиноидных сетках и блочном оксидном катализаторе сотовой структуры : автореф. дис. ... канд. техн. наук : 05.17.01 / Головня Егор Викторович ; Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева – Москва, 2009. – 21 с.