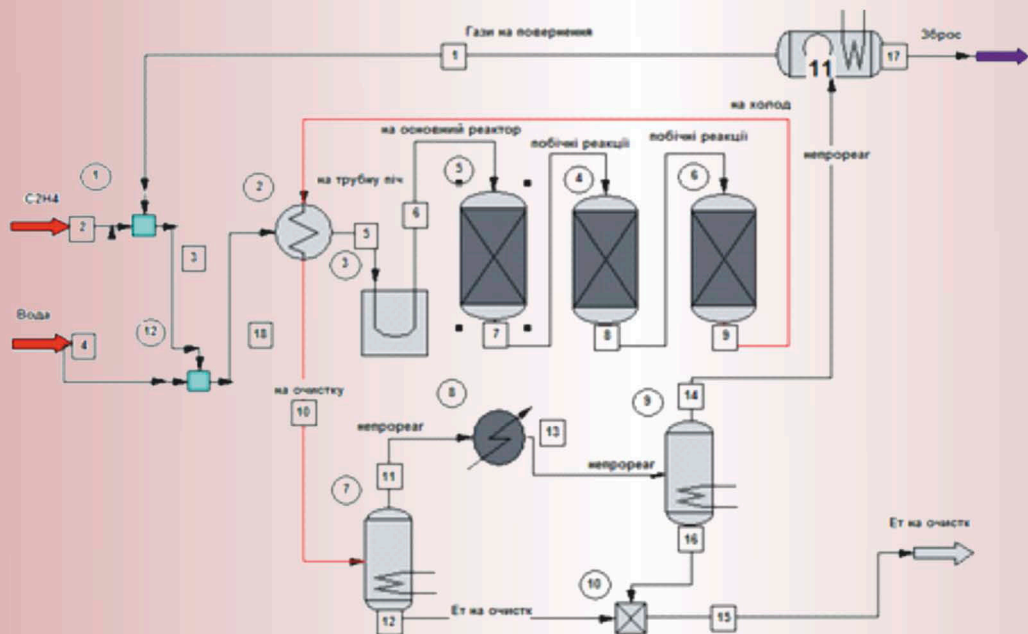


Людмила Миколаївна Бугаєва
Тетяна Владиславівна Бойко
Юрій Олександрович Безносик

СИСТЕМНИЙ АНАЛІЗ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ КОМПЛЕКСІВ



Київ
2017

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ УКРАЇНИ
«КИЇВСЬКИЙ ПОЛІТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ
імені ІГОРЯ СІКОРСЬКОГО»

Людмила Миколаївна Бугаєва
Тетяна Владиславівна Бойко
Юрій Олександрович Безносик

СИСТЕМНИЙ АНАЛІЗ
ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ КОМПЛЕКСІВ

Затверджено Вченою радою КПІ ім. Ігоря Сікорського
як підручник
для студентів, які навчаються за спеціальністю
«Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології»

Київ
КПІ ім. Ігоря Сікорського
2017

УДК 66.02:004.42(075.8)

ББК 35(075.8)

Б

*Гриф надано Вченою радою Національного технічного університету України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
(протокол № 6 від 12 червня 2017)*

СИСТЕМНИЙ АНАЛІЗ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ КОМПЛЕКСІВ : підручник /
Л.М. Бугаєва, Т.В. Бойко, Ю.О. Безносик. – КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2017. – 254 с.

У підручнику викладені методи та засоби системного аналізу, що можуть застосовуватись при дослідженні складних хіміко-технологічних систем та рішенні задач пов'язаних із сталими виробничими процесами. Надано багато прикладів рішення задач аналізу хіміко-технологічних процесів із використанням сучасних програмних засобів Aspen Plus, Hysys та Chemcad.

Підручник призначений в першу чергу для магістрів спеціальності «151 – Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології» при вивченні дисципліни «Системний аналіз». Компетенції, отримані студентами в процесі вивчення цієї дисципліни застосовуються ними при виконанні магістерської дисертації. Крім того, книга може бути корисною аспірантам, науковим працівникам та інженерам – всім, хто стикається із необхідністю дослідження складних хіміко-технологічних систем задля забезпечення їх еко-ефективності.

The textbook describes the methods and tools of system analysis that can be used to study complex chemical-technological systems and solve problems associated with sustainable production processes. Many examples of solving the problems of analysis of chemical-technological systems with the use of modern software tools Aspen Plus, Hysys and Chemcad are provided.

The textbook is intended primarily for masters of the specialty "151 – Automation and Computer-Integrated Technologies" under studying the discipline "System Analysis". The competences obtained by students in the process of studying this discipline are used by them in the fulfilment of the master's thesis. In addition, the book can be useful for post-graduate students, scientists and engineers – all who are faced with the need to research complex chemical and technological systems to ensure their eco-efficiency.

Автори:

Бугаєва Людмила Миколаївна, доцент, кандидат технічних наук

Бойко Тетяна Владиславівна, доцент, кандидат технічних наук

Безносик Юрій Олександрович, доцент, кандидат технічних наук

Рецензенти:

Атаманюк В.М., доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри хімічної інженерії Національного університету «Львівська політехніка»

Ладанюк А.П., доктор технічних наук, професор, завідувач кафедри автоматизації та інтелектуальних систем керування Національного університету харчових технологій

Цейтлін М.А., доктор технічних наук, професор, професор кафедри хімічної техніки та промислової екології Національного технічного університету «Харківський політехнічний інститут»

Відповідальний редактор:

Складаний Д.М., доцент, кандидат технічних наук, доцент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів КПІ імені Ігоря Сікорського

ISBN

© Л.М. Бугаєва, Т.В. Бойко, Ю.О. Безносик, 2017

© КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2017

ЗМІСТ

ВСТУП	5
Частина I.	
Зміст системного аналізу та його застосування при розробці та дослідженні складних хіміко-технологічних систем	7
Розділ 1. Системний аналіз як прикладна системна методологія. Властивості та принципи системної методології	7
1.1. Властивості системних задач й системної методології	7
1.2. Характеристики формалізуємих задач системного аналізу	9
1.3. Зміст системного підходу при розробці та дослідженні хіміко-технологічних комплексів	9
1.3.1. Керування технологічними підсистемами	10
1.3.2. Моделювання та прогнозування станів технологічних підсистем	10
1.4. Запитання та завдання для самоперевірки	11
Розділ 2. Сталий розвиток суспільства як об'єкт системного аналізу	12
2.1. Системний аналіз у структурі інших методів дослідження систем	12
2.2. Сталий розвиток в контексті системного аналізу	12
2.3. Запитання та завдання для самоперевірки	14
Розділ 3. Хіміко-технологічні схеми та задачі їх дослідження з позицій системного аналізу	15
3.1. Поняття хіміко-технологічних систем	15
3.2. Елемент хіміко-технологічної системи та його характеристики	16
3.3. Технологічна структура хіміко-технологічних систем	19
3.4. Класифікація змінних величин, які характеризують роботу хіміко-технологічних систем	21
3.5. Властивості хіміко-технологічних систем	22
3.6. Ієрархія підсистем хіміко-технологічних систем	23
3.7. Задачі, які розв'язують при проектуванні хіміко-технологічних систем	23
3.8. Запитання та завдання для самоперевірки	24
Розділ 4. Задачі системного аналізу для об'єктів типу складних хіміко-технологічних систем	25
4.1. Моделювання хіміко-технологічних процесів та систем	25
4.2. Моделювання структури ХТС із використанням теорії графів	26
4.3. Моделювання статичних режимів ХТС на основі обчислення матеріальних та теплових балансів	28
4.4. Матричний метод розрахунку хіміко-технологічних систем	34
4.5. Структурний аналіз замкнених ХТС, алгоритм та призначення	40
4.5.1. Алгоритм виділення комплексів	40
4.5.2. Визначення послідовності розрахунку розімкнених хіміко-технологічних систем	42
4.6. Стратегія розробки складних технологічних систем на прикладі хімічного виробництва	45
4.7. Запитання та завдання для самоперевірки	48
Частина II.	
Методи та засоби рішення задач системного аналізу	49
Розділ 5. Програмне забезпечення для моделювання та дослідження ХТС. Основні принципи побудови моделюючих програм в хімічній інженерії	49
5.1. Програма-симулятор Aspen Plus	51

5.1.1. Інтерфейс Aspen Plus.....	53
5.1.2. Панелі інструментів Aspen Plus.....	60
5.1.3. Бібліотека моделей.....	61
5.2. Програма Hysys.....	65
5.3. Моделююча програма PROvision.....	67
5.4. Програма Chemcad та її можливості. Спеціальні можливості аналізу ХТС в програмному середовищі Chemcad.....	70
5.5. Спеціальні програмні засоби дослідження властивостей хіміко-технологічних процесів та оцінювання їх впливів на оточуюче середовище.....	88
5.5.1. Методика проведення дослідження за алгоритмом WAR.....	88
5.5.2. Використання методики на прикладі виробництва метил етилкетону з вторинного бутилового спирту.....	93
5.6. Запитання та завдання для самоперевірки.....	102
Розділ 6. Метод статистичних випробувань для врахування випадковостей при моделюванні та аналізі складних систем.....	103
6.1. Одиначний жереб і форми його організації.....	103
6.2. Засоби розіграшу випадкових чисел.....	105
6.3. Імітаційна модель.....	105
6.4. Застосування методу Монте-Карло.....	106
6.5. Запитання та завдання для самоперевірки.....	106
Розділ 7. Мережі Петрі для рішення системних задач із дискретними процесами.....	107
7.1. Моделювання паралельних процесів за допомогою мережевих моделей.....	107
7.2. Моделювання та аналіз дискретних процесів за допомогою мереж Петрі.....	108
7.3. Загальна структура мереж Петрі.....	108
7.4. Виконання мереж Петрі.....	111
7.5. Простір станів мереж Петрі.....	113
7.6. Використання мереж Петрі.....	114
7.7. Аналіз мереж Петрі.....	115
7.7.1. Методи аналізу досяжності.....	116
7.7.2. Приклад аналізу досяжності.....	116
7.8. Запитання та завдання для самоперевірки.....	118
Розділ 8. Метод системної динаміки Дж. Форестера.....	119
8.1. Виникнення та розвиток методів системної динаміки.....	119
8.2. Реалізація методу системної динаміки Форестера.....	121
8.3. Програмне забезпечення методу.....	124
8.4. Запитання та завдання для самоперевірки.....	126
Додаток А. Моделювання статичних режимів хіміко-технологічних систем засобами програми Hysys 3.2.....	127
Додаток Б. Приклади рішення технологічних задач із використанням програми Aspen Plus.....	140
Додаток В. Приклади рішення технологічних задач із використанням програми Chemcad.....	179
Додаток Г. Оцінювання сталого розвитку хіміко-технологічних процесів на основі теорії потенційного екологічного впливу.....	217
Додаток Д. Приклади застосування системної динаміки.....	230
ВИСНОВКИ.....	246
СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ.....	247
ПРЕДМЕТНИЙ ПОКАЖЧИК.....	248

ВСТУП

В даному підручнику системний аналіз викладається як прикладна наукова методологія, що реалізує підхід від практичної задачі — до пошуку методу її рішення. Основну увагу автори приділяють задачам, пов'язаним з хімічною технологією та сталим розвитком.

У підручнику хіміко-технологічні схеми (ХТС) розглядаються, як складні системи. Розробка нового хімічного виробництва або вдосконалення існуючого завжди пов'язана із рішенням низки задач з розрахунками хіміко-технологічних схем та їх аналізом в різних умовах функціонування. Складність розв'язку таких задач пов'язана в першу чергу з тим, що найчастіше схеми складаються із великої кількості апаратів, а по-друге для більш ефективної роботи мають багато зворотних зв'язків. Тому для таких розрахунків ХТС було розроблено ряд методів структурного аналізу схем та їх розрахунку, що знайшли своє втілення у сучасних комп'ютерних засобах моделювання ХТС.

Авторами розглянуто можливості представлення технологічної та топологічної структури системи. Сформульовано задачі структурного аналізу ХТС та дано методи їх рішення. Розглянуто основні підходи при розрахунку ХТС: інтегральний та декомпозиційний. Наведено методику складання єдиної матриці для ХТС при інтегральному підході на базі матриць, що описують лінійні моделі окремих апаратів схеми. Показано, що використання декомпозиційного підходу потребує проведення структурного аналізу схем із зворотними зв'язками для представлення їх у розімкненому вигляді, що дає можливість їх послідовного розрахунку.

Декомпозиційний метод розрахунку ХТС знайшов своє втілення у сучасних програмах-симуляторах, найпоширеніші з яких Aspen Plus, Hysys, Chemcad, PRO/II, представлено у підручнику. Роботу цих програм на прикладах розрахунку та дослідження низки хіміко-технологічних процесів показано в додатках А, Б книги.

Розглянуті програми-симулятори крім основного призначення рахувати матеріальні баланси, мають ще й засоби для дослідження процесів та систем хімічних виробництв. В цьому підручнику автори вважали за потрібне розказати про відносно новий інструмент дослідження ХТС, відомий під назвою алгоритм зниження викидів *WAR (Waste Reduction Algorithm)*, розроблений Американською агенцією з охорони навколишнього середовища. Алгоритм базується на концепції балансу навколишнього середовища подібно до матеріальних та енергетичних балансів. Цей метод застосовується на етапі проектування процесу та використовує, як інформацію по витратам потоків, масових долях та ін., так і дані з токсичності процесу, для обчислення впливу процесу на оточуюче середовище. Алгоритм *WAR* може бути інструментом для рішення задачі оцінювання сталості виробництва на основі порівняння потенціальних впливів на оточуюче середовище різних проектних варіантів процесу.

Відомо, що для комп'ютерного експерименту з метою дослідження, проектування, аналізу та оцінки функціонування складних систем може бути використана їх імітаційна модель. Оскільки основою імітаційного моделювання є метод статистичних випробувань або метод Монте-Карло, автори розглянули можливість його застосування для комп'ютерних експериментів із складними системами.

Крім того, автори вважали за потрібне розглянути метод дослідження мережами Петрі, який зазвичай, застосовується для паралельних дискретних процесів. На погляд авторів книги, задача аналізу досяжності деякого стану системою (мережею Петрі)

може бути актуальною для аналізу еколого-економічних систем, які є об'єктом дослідження в задачах сталого розвитку.

В даний час існує багато напрямків розвитку системного підходу і навіть постулюється, що розвиток системного підходу і системного мислення є ключовим для виживання людства, а тому і для забезпечення сталого розвитку суспільства. Апарат системної динаміки є одним з найбільш потужних інструментів, які використовуються в наш час для аналізу і проектування складних систем, тому він також включений в перелік методів дослідження, які розглядаються в даному виданні.

Підручник призначений в першу чергу для магістрів спеціальності «151 – Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології» при вивченні дисципліни «Системний аналіз» у першому навчальному семестрі. Предмет дисципліни – це методи та засоби системного аналізу, що можуть застосовуватись при дослідженні складних хіміко-технологічних систем та рішенні задач пов'язаних із сталими виробничими процесами. Компетенції, отримані студентами в процесі вивчення цієї дисципліни застосовуються ними при виконанні магістерської дисертації. Крім того, книга може бути корисною аспірантам, науковим працівникам та інженерам – всім, хто стикається із необхідністю дослідження складних хіміко-технологічних систем задля забезпечення їх еко-ефективності.

Частина I. Зміст системного аналізу та його застосування при розробці та дослідженні складних хіміко-технологічних систем

Розділ 1. Системний аналіз як прикладна системна методологія. Властивості та принципи системної методології

Як було сказано раніше, в даному курсі системний аналіз розглядається як прикладна наукова методологія, що реалізує підхід від практичної задачі — до пошуку методу її рішення.

Суть цього принципу полягає у наступному:

- є реальна задача системного аналізу із практичними фізичними, економічними або іншими цілями, критеріями, обмеженнями та припущеннями;
- необхідно знайти, вибрати або запропонувати метод її рішення.

В більшості випадків з'являється необхідність адаптувати, удосконалити й пристосувати відомі методи до прикладних задач системного аналізу, визначити область їхнього доцільного застосування, дати порівняльний аналіз їхніх переваг і недоліків, вказати можливі напрямки «ослаблення» виявлених недоліків при рішенні конкретних класів прикладних задач системного аналізу.

1.1. Властивості системних задач й системної методології

Складні системи, що можуть бути формалізовані (СФС), відрізняються характерними рисами.

1. У таких системах реалізується можливість функціонування.

2. Існує важливий клас складних систем, що складаються із вкрай різномірних підсистем. У зв'язку із цим їхній адекватний опис за допомогою однієї мови неможливий. Приклад – еколого-економічні системи (ЕЕС).

Розглянемо комплекс задач аналізу складних формалізованих систем і прийняття рішень, що визначають їх поведінку. В роботах академіка Згуровського М.З. зроблено спробу систематизувати ці взаємозалежні задачі до чотирьохрівневої ієрархічної структури.

Перший рівень. На даному рівні проводяться натурні експерименти, моніторинг, тобто здійснюється вивчення СФС як об'єкта системного аналізу, вирішуються задача збору, обробки й оцінювання інформації про СФС.

На цьому етапі також відбувається збір якісної семантичної інформації у формі суб'єктивних даних, одержуваних від експертів, які мають великий досвід у практичному вивченні СФС, з метою істотного поповнення доступної для аналізу інформації.

Технологічні підсистеми ЕЕС, серед яких визначне місце займають хіміко-технологічні підсистеми, є такі підсистеми, стани яких можуть бути представлені у вигляді розподілених числових полів, вимірюваних значень або значень певних параметрів, що обчислюються, які характеризують протікання в різних середовищах фізичних, фізико-хімічних, біологічних і інших процесів і зміна пов'язаних із цими процесами ресурсів. Прикладами таких підсистем можуть бути повітряне середовище промислового регіону, ставки-охолоджувачі потужних електростанцій, водні шари та т.

ін. Поведінка таких систем повністю визначається адекватним математичним описом у вигляді, наприклад, систем диференціальних або алгебраїчних рівнянь.

Технологічні впливи реалізуються у формі керуючих впливів на СФС. Тип і характеристики зазначених впливів визначаються на другому рівні підсистемами семантичного й кількісного аналізу.

Другий рівень. Вивчення СФС як об'єкта системного аналізу має на меті одержати основні теоретичні знання про об'єкт, які можуть бути отримані шляхом вивчення фізико-хімічних, економічних, соціальних і інших процесів, що лежать в основі поведінки СФС, проведення цілеспрямованих і спланованих експериментів, ретельного пасивного вивчення поведінки об'єкта. Результатом цієї діяльності повинні бути рекомендації з побудови системи знань про об'єкт, а також найкращої організації збору та обробки кількісної і якісної інформації, що буде основою для аналізу функціонування й прийняття необхідних рішень.

Отримані після аналізу й обробки кількісні дані є вихідними для рішення комплексу задач моделювання й керування технологічними підсистемами. Кількісний аналіз, прогноз поведінки, знаходження й реалізація оптимальних за заданими критеріями режимів функціонування технологічних підсистем СФС можуть бути проведені методами математичної фізики й обчислювальної математики з урахуванням стохастичних факторів.

Підсистема кількісного аналізу призначена для проведення повномасштабного експерименту над СФС із метою підготовки до прийняття рішень по цілеспрямованій зміні її поведінки.

Третій рівень. Цей рівень є програмно-технічним інструментарієм для особи, що приймає рішення (ОПР). На ньому здійснюються узгодження різномірної інформації кількісного і якісного характеру, витяг і подання знань і даних за допомогою відповідних БД і БЗ, створення експертних систем і вироблення рекомендацій для організаційних підсистем СФС. Для приведення інформації до одного виду здійснюється її подання в деякій універсальній формі за допомогою так званих лінгвістичних змінних або предикатів. Отримана в такому виді інформація обробляється за допомогою спеціальних математичних методів моделювання, прогнозування, передбачення або керування, сформульованих у нечіткій постановці. На основі обробки інформації, представленій в універсальному виді, за допомогою зазначених методів створюються бази даних і бази знань, що є основою експертних систем, які використовуються людиною для формування рішень на четвертому рівні ієрархічної системи.

Четвертий рівень. Стан СФС, представлений відомими станами всіх технологічних і організаційних підсистем, є вихідним для прийняття рішень щодо функціонування СФС. При цьому рішення приймається особою, що приймає рішення (ОПР), яка спирається на наступну інформацію:

- результати роботи експертної системи (третього рівня);
- результати роботи групи експертів четвертого рівня (якій відомі рекомендації експертної системи);
- дані моніторингу, також інформація про стан всіх технологічних і організаційних підсистем;
- відомі ОПР або сформульовані їм мети й умови функціонування СФС;
- рішення, прийняте ОПР, реалізується в СФС.

Під системним аналізом СФС будемо розуміти процес застосування математичних, організаційних і методологічних засобів, призначених для прийняття

рішень у СФС при наявності істотних ризиків, інформації різної природи, існуванні множини різних і найчастіше суперечливих критеріїв і цілей, і з урахуванням істотних невизначеностей на різних етапах розробки рішень.

1.2. Характеристики формалізуємих задач системного аналізу

Проведений аналіз властивостей СФС і розгляд комплексів задач, що виникають при їхньому вивченні, дозволяє вказати на наступні особливості такого роду досліджень:

- СФС містять велику кількість різнорідних підсистем з великим числом взаємозв'язків носіїв інформації різного характеру;
- для прийняття рішень щодо цілеспрямованої зміни поведінки СФС необхідно вирішувати велику кількість взаємозалежних задач із використанням різних методів як кількісного і якісного аналізу, так і знань, і досвіду людини;
- наявність фактора невизначеності: при дослідженні СФС.

Ці особливості визначають використання для дослідження СФС методів і засобів теорії системного аналізу.

Розглянуті задачі та методи аналізу даних дозволяють сформувати структуру інформаційного забезпечення досліджень СФС.

Можна виділити основні складові такої структури:

- програмно-апаратні комплекси, що базуються на носіях, які забезпечують автоматизований збір, зберігання, оперативну обробку інформації й оптимальне керування її збором;
- банки вимірювальних даних, що забезпечують зберігання й колективне використання великих масивів різнорідної інформації;
- розвинене програмне забезпечення, оформлене у вигляді пакетів прикладних програм, що дозволяють реалізувати статистичний і структурний аналіз даних з банку й проводити пошук залежностей;
- база моделей, що дозволяє на основі максимально повних динамічних моделей здійснювати обчислювальний експеримент із розрахунку досліджуваних середовищ;
- експертні системи для проведення аналізу ситуацій і вироблення прогностичних рішень.

1.3. Зміст системного підходу при розробці та дослідженні хіміко-технологічних комплексів

В нашому підручнику розглянуті практичні задачі – це, насамперед, задачі, пов'язані з хімічною технологією та сталим розвитком. Назвемо найважливіші з них:

- Керування технологічними підсистемами.
- Моделювання та прогнозування станів технологічних систем.

1.3.1. Керування технологічними підсистемами

Ціль задачі керування складається у визначенні керуючих впливів у заданих областях або точках просторової області, що забезпечують переведення розглянутих задач із одного стану в інше й мінімізуючих (максимізуючих) деякі показники якості.

Дана задача є найпоширенішою й вивченою серед задач системного аналізу. Основою даного класу методів є теорія оптимального керування для систем з розподіленими й зосередженими параметрами.

У результаті реалізації методів керування можуть бути отримані, наприклад, для еколого-економічних систем програми цілеспрямованої зміни інтенсивності шкідливих викидів в атмосферу й водойми з метою мінімізації екологічного збитку і т. ін.

1.3.2. Моделювання та прогнозування станів технологічних підсистем

Ціль подібних задач - одержання інформації про стан досліджуваних середовищ у наперед заданому інтервалі часу по відомим до цього часу керуванням, початковим і граничним умовам, а також іншої інформації. Підходи до рішення зазначених задач ґрунтуються на широкому арсеналі методів обчислювальної математики для диференціальних рівнянь у частинних похідних і алгебраїчних регресійних моделях. Для рішення зазначених задач, у першу чергу, необхідно виконати математичний опис розглянутих підсистем.

Цілісний математичний опис поведінки СФС, що включають організаційні й технологічні підсистеми, між якими існує обмін різної за своєю природою інформацією, припускає використання різноманітних методів як кількісного, так і якісного характеру.

При цьому багато елементів СФС успішно можуть бути описані кількісними методами, заснованими, наприклад, на рівняннях математичної фізики або алгебраїчних регресійних співвідношеннях. Однак кількісні методи, що добре себе зарекомендували при описі технологічних підсистем, у силу ряду недоліків не можуть бути використані для опису організаційних підсистем СФС. Це пов'язане з тим, що інформація в організаційних підсистемах може мати не тільки кількісне подання, але й подання у вигляді знань - правил, евристик, наборів ранжованих альтернатив та інших характеристик, які описуються за допомогою значень лінгвістичних змінних і т. ін.

На основі об'єднання всієї сукупності якісних і кількісних методів, евристик в так звані бази знань, що відповідають конкретній предметній області, створюються спеціальні інтелектуальні програмні засоби (експертні системи або системи підтримки прийняття рішень), призначені допомагати прийняттю рішень людиною або групою експертів.

Таким чином, сукупність розглянутих методів і підходів системного аналізу стосовно до дослідження СФС відкриває можливість вирішувати весь комплекс задач, пов'язаних з моделюванням, прогнозуванням і виробленням рішень, що дозволяють цілеспрямовано змінювати й контролювати їхню поведінку.

В наступних розділах буде показано, що складні хіміко-технологічні комплекси (СХТК) можна розглядати як СФС з усіма притаманними їм властивостями. Звідси випливає, що СХТК можуть бути об'єктами дослідження системного аналізу із використанням всіх його можливих методів та засобів.

1.4. Запитання та завдання для самоперевірки

1. Доведіть, що складні хіміко-технологічні комплекси можна розглядати як СФС.
2. Як виглядає ієрархічна структура задач системного аналізу СФС?
3. Які характерні риси мають СФС? Проілюструйте на прикладі.
4. В чому полягає задача моделювання та прогнозування станів технологічних підсистем? Поясніть на прикладі (бажано виконуваної курсової роботи по дисципліні).
5. В чому полягає задача керування технологічними підсистемами? Наведіть приклади.
6. Якими кількісними методами ви користувались в різних дисциплінах для опису технологічних підсистем?
7. Опишіть структуру інформаційного забезпечення досліджень СФС. Наведіть приклади компонентів цієї структури, з якими ви стикалися при виконанні курсової роботи.
8. Наведіть основні характеристики формалізуємих задач системного аналізу. Проілюструйте на прикладі.
9. Які чотири рівні задач системного аналізу можна розглядати?
10. В чому полягають задачі кожного з цих рівней? Підготуйте приклади для ілюстрації задач кожного із запропонованих рівней.

Розділ 2. Сталий розвиток суспільства як об'єкт системного аналізу

2.1. Системний аналіз у структурі інших методів дослідження систем

Історично становлення системних уявлень відбувалось в різних напрямках і різних галузях наукового знання. Це призвело до виникнення низки взаємопов'язаних понять, що відображають не тільки способи дослідження систем, але й керуються принципом системності – системний підхід, загальна теорія систем, синергетика, системний аналіз, системна інженерія, комплексний аналіз та дослідження операцій. І хоча ці поняття зазвичай використовуються як взаємозамінні, вони мають свої нюанси.

Системний аналіз, на відміну від загальної теорії систем та синергетики, це не науковий напрям, а загальнонауковий метод зі своїми принципами, етапами проведення та технологіями.

Для дослідження операцій системний аналіз – це своєрідний фундамент, технологія, оскільки він дозволяє розглядати будь-яке завдання в контексті існування та функціонування явища чи процесу, що вивчається, як системи. Дослідження операцій передбачає використання переважно математичних методів, в той час як системний аналіз може відбуватися з мінімальним використанням математики.

Основна увага при використанні системного аналізу приділяється досягненню кінцевої мети – прийняттю рішення, яке б дозволило максимально ефективно розв'язати визначену на початку дослідження проблему.

2.2. Сталий розвиток в контексті системного аналізу

Як відомо, проблема сталого розвитку – найбільш актуальна проблема сьогодення. Термін «сталий розвиток» офіційно був прийнятий на Всесвітній конференції ООН з навколишнього середовища і розвитку, що проходила у Ріо-де-Жанейро 1992 року. Спочатку «сталий розвиток» представлявся екологічним терміном. Він зіграв важливу роль, посприявши усвідомленню необхідності збереження рівноваги людини з природою. В умовах наростання динаміки соціальних систем проблема стійкості стала набувати більш широкого звучання і була поширена на економічні та соціальні процеси. Сучасний підхід при оцінюванні сталого розвитку розглядає три складові: соціальну, економічну та екологічну. На сьогоднішній день існує безліч методик оцінювання сталого розвитку на всіх рівнях від локальних регіонів та окремих підприємств до глобальних в рамках планети Земля. Задля забезпечення життя майбутніх поколінь в умовах сталості прийнято багато програм в рамках окремих держав та міжнародних організацій. Очевидно, що рішення проблем сталого розвитку може ґрунтуватися лише на системному баченні.

Насправді термін «сталий розвиток» можна вважати категорією загальної теорії систем, тобто він характеризує системи будь-якої природи. Стійкість і нестійкість системи являють собою дві сторони процесу розвитку. Будь-який розвиток - це чергування і взаємодія стійкості і нестійкості. Чим більш складна мета, яка стоїть перед системою, тим імовірніше виникнення ситуацій залежності системи від факторів навколишнього середовища. В цьому випадку система відхиляється від вихідної точки рівноваги, намагаючись знайти нову точку рівноваги.

Оскільки розвиток є незворотній, спрямований, закономірний перехід будь-якої системи з одного стану в інший, що відрізняється від попереднього стану збільшеннями або зменшеннями деяких параметрів, то сталий розвиток складається із стійкості

системи та стійкості її процесів. При цьому стійкість системи складається з її структурно-організаційної та функціональної стійкості. Стійку і нестійку системи можна уявити досить спрощеними механічними моделями.

Стійкість системи – здатність її повертатися в стан рівноваги, яке є найбільш сприятливим для виконання системою функцій після впливу на систему будь-яких зовнішніх факторів. Стійкість процесу – це властивість системи використовувати зовнішні фактори впливу таким чином, що система після відхилення від траєкторії повертається на свою ж траєкторію. Таким чином, стійкість розвитку можна розглядати як послідовну прогнозовану з високим ступенем ймовірності зміну станів системи, її здатність протидіяти несприятливим зовнішнім впливам.

У сучасній теорії систем велика увага приділяється саморозвитку систем. Саморозвиток – це розвиток системи за рахунок внутрішніх ресурсів і джерел за власною програмою. Саморозвиток передбачає наявність в системі власних механізмів та вивчається наукою, що отримала назву синергетика.

Синергетика (англ. Synergetics, від грецького син – «спільне» і ергос – «дія») – міждисциплінарна наука, що займається вивченням процесів самоорганізації та виникнення, підтримки стійкості і розпаду структур (систем) різної природи на основі методів математичної фізики («формальних технологій»).

Синергетика – це теорія самоорганізації в системах різноманітної природи. Вона має справу з явищами та процесами, в результаті яких в системі в цілому можуть з'явитися властивості, якими не володіє жодна з частин. Оскільки йдеться про виявлення та використання загальних закономірностей в різних галузях, тому такий підхід передбачає міждисциплінарність.

Для ефективної практичної діяльності людей нерідко буває важливо мати більш-менш чіткі уявлення про майбутнє систем, і в першу чергу про розвиток суспільства та його підсистем. Проблема тут полягає в тому, що майбутнє системи залежить від значного числа внутрішніх факторів. Системним називається таке майбутнє, яке обумовлено розвитком самої системи, її механізмами, можливостями, ресурсами. Але система не існує сама по собі. В її розвиток втручається людський фактор, який цілеспрямовано починає планувати майбутнє. У зв'язку з цим на майбутнє накладають відбиток мети, інтереси і цінності людей.

Майбутнє різниться за спрямованістю перетворень як прогресивне (інноваційне), консервативне і реакційне. Майбутнє може бути зумовлено законами розвитку системи. Наприклад це властиво для циклічних систем, які повторюють себе на новому більш високому рівні розвитку. Але в ряді випадків майбутнє носить імовірнісний характер і реалізується в результаті збігу випадкових подій з певним рівнем імовірності. Важливо також, що джерела майбутнього можуть лежати всередині системи або зовні, тобто при домінуванні зовнішніх або внутрішніх факторів.

Стосовно майбутнього в теорії систем формулюється декілька найважливіших проблем:

- Визначення ступеня свободи людини у впливі на систему з метою досягнення бажаного майбутнього при наявності обмежень людських можливостей впливати на системи та із врахуванням порогу чутливості систем. При цьому найголовніше – це природні закони розвитку системи, порушення яких може призвести до жахливих наслідків у майбутньому через вторгнення людини в природний хід подій.
- Вивчення та приведення в рух системних механізмів досягнення майбутнього. Майбутнє не просто стан системи, а складна динамічна системна якість. Тобто в

майбутньому система повинна бути здатною функціонувати на якісно новому рівні, забезпечуючи нові функції усіма складовими системи.

- Проблема траєкторії руху системи до майбутнього, яка по відношенню до системи являє собою пучок траєкторій, що формується рухом в майбутнє окремих підсистем і елементів. При цьому окремі складові системи досить успішно переживають кризові процеси, швидко оновлюються, інші рухаються ривками, а треті затримуються в розвитку настільки, що негативно впливають на рух всієї системи в майбутнє.
- Побудова критеріїв істинності та цінності того чи іншого варіанту моделі майбутнього системи.

Для використання системного підходу в якості провідного для дослідження актуальних проблем соціального розвитку треба подати механізм його застосування, тобто вибудувати конкретну схему пояснення предмета дослідження – системного аналізу управління сталим розвитком. Під схемою пояснення розуміється спосіб організації концептуального апарату, що задає загальну стратегію наукового дослідження. Це означає, що теоретичну частину проблеми визначено, а надалі має бути сформовані інформаційна, технологічна, кадрова і педагогічна складові системного аналізу сталого розвитку.

2.3. Запитання та завдання для самоперевірки

1. Визначення сталого розвитку.
2. Які головні етапи у становленні сталого розвитку?
3. Які головні документи та програми сталого розвитку ви знаєте?
4. Які методи оцінювання сталого розвитку ви знаєте?
5. Програми сталого розвитку в світі та Україні.
6. Що таке розвиток з точки зору системного аналізу.
7. Як ви розумієте термін синергетика?
8. Ваше бачення можливості сталого розвитку для України.

Розділ 3. Хіміко-технологічні схеми та задачі їх дослідження

з позицій системного аналізу

3.1. Поняття хіміко-технологічних систем

В будь-якому хімічному виробництві завжди існує функціональний взаємозв'язок апаратів. Так, в технологічній схемі, яка включає в себе теплообмінник 1 та реактор 2 (рис.3.1), початковий потік сировини нагрівається за рахунок теплоти реакційної суміші, причому кількість виробленої в реакторі теплоти залежить від температури потоку на виході із теплообмінника. Також існує зв'язок між абсорбером та ректифікаційною колоною в системі розділення продуктів – більш інтенсивно працюючий абсорбер зумовлює найменші вимоги до ректифікації. Таким чином, необхідно розглядати технологічну схему хімічного виробництва в цілому та визначати характеристики окремих процесів у відповідності із загальною задачею дослідження ефективності всього виробництва.

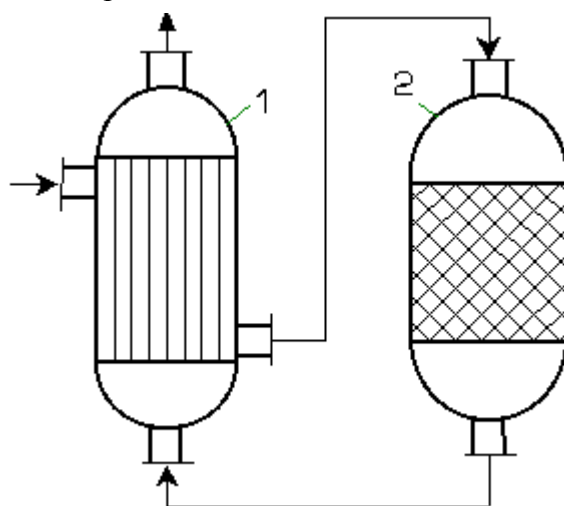


Рис.3.1. Фрагмент технологічної схеми, яка включає в себе теплообмінник (1) та реактор (2)

Важлива властивість функціонування хімічного виробництва – його цілеспрямованість, тобто випуск продукції певної якості та заданої кількості. Таким чином, ХТС можна розглядати як “велику систему”, якій властиві всі ознаки таких систем: велике число взаємозв’язаних елементів, цілеспрямованість, складна поведінка та ін.

Під ХТС будемо розуміти сукупність взаємозв’язаних технологічними потоками апаратів, що діють як одне ціле, в яких здійснюється певна послідовність технологічних операцій: підготовка сировини, власне хімічне перетворення, очистка та одержання готового продукту.

Наприклад, процес отримання сульфату барію (рис.3.2 а) можна представити таким чином: приготування розчинів хлориду барію та сульфату натрію (розчинення в розчинниках 1 та 2, куди подається гідроксид натрію та водяний пар), хімічне перетворення в реакторі 3. Потім цільовий продукт – сульфат барію – відмивається в промивнику 4, відділяється на центрифугі 5 та направляється в сушарку 6.

3.2. Елемент хіміко-технологічної системи та його характеристики

Під елементом ХТС будемо розуміти ту частину ХТС, яка в проведеному розгляді являється неподільною. Це може бути апарат (чи сукупність їх, чи окрема частина апарату), в котрому відбувається хіміко-технологічний процес, який якісно (або) та кількісно перетворює фізичні змінні вхідних матеріальних та енергетичних потоків x_1, x_2, \dots, x_m на фізичні змінні вихідних матеріальних та енергетичних потоків y_1, y_2, \dots, y_n . Наприклад, в реакторі окислення оксиду сірки (IV) протікають якісне (на виході реактора присутній новий компонент – триоксид сірки) та кількісне (змінюються концентрації речовин, температура внаслідок екзотермічної реакції) перетворення фізичних параметрів вхідного потоку. Крім вхідних та вихідних змінних елементу розпізнають конструктивні та технологічні параметри. Конструктивні параметри: геометричні характеристики апарату, об'єм каталізатора в реакторі, кількість тарілок в ректифікаційній колоні, площа поверхні теплообміну та розташування труб в теплообміннику. Технологічні параметри – це константи швидкості хімічних реакцій, флегмове число, номер тарілки живлення для ректифікаційної колони, густина зрошення в абсорбері та ін.

Конструктивні та технологічні змінні дають змогу керувати процесом, тому їх називають керуючими змінними, або просто управліннями.

Таким чином, кожний елемент ХТС здійснює перетворення, яке може бути представлене функціональною залежністю:

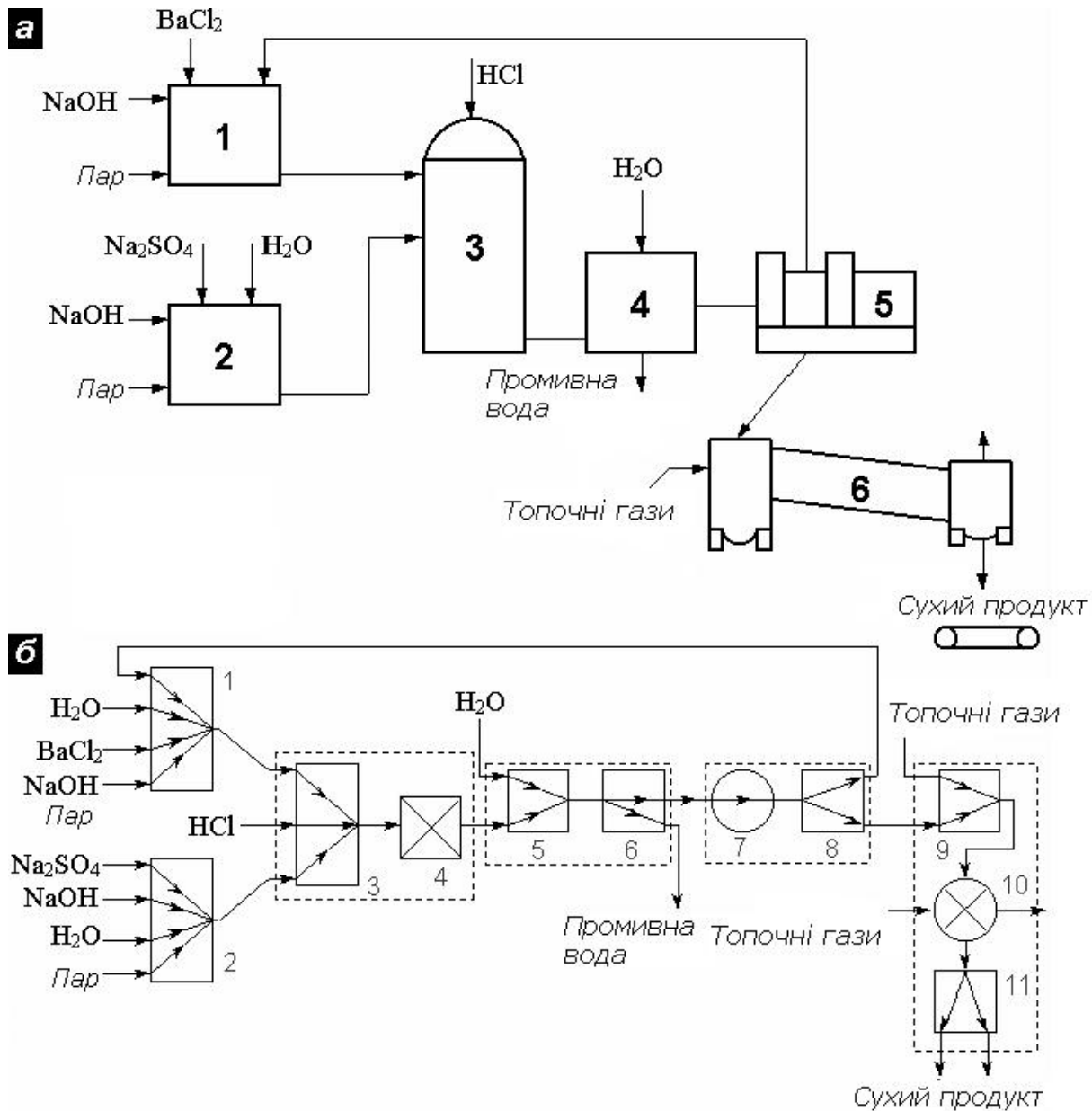
$$Y = F(X, U) \quad (3.1)$$

де Y та X – вектори параметрів стану вихідних та вхідних потоків; U - вектор керування.

Процеси, які відбуваються в апаратах, представляють на схемах у вигляді типових технологічних операторів (ТО), які поділяються на основні та допоміжні (рис.3.3). Основні ТО забезпечують функціонування ХТС у потрібному (цільовому) напрямку; допоміжні ТО використовують для підвищення ефективності функціонування системи шляхом зміни фазового й енергетичного стану технологічних потоків. ТО відповідає типовому процесу хімічної технології і відображує якісні або кількісні перетворення вхідних технологічних потоків у вихідні матеріальні та енергетичні потоки. За допомогою таких операторів можна будувати різні структури ХТС, з'єднуючи оператори різними технологічними зв'язками (див. рис.3.2 б).

Окремі апарати, які входять до складу ХТС, можуть виконувати одночасно функції кількох типових ТО. Наприклад, хімічний реактор може одночасно виконувати функції елемента хімічного перетворення та теплообміну. Тому на схемі такий реактор може бути представлений у вигляді сукупності двох технологічних операторів, як це показано на рис.3.4.

Елемент ХТС називають вхідним, якщо в нього попадає потік, який є зовнішнім по відношенню до даної системи.



а) 1, 2 – розчинники $BaCl_2$ та Na_2SO_4 ; 3 – реактор; 4 – промивник;
5 – центрифуга; 6 – сушарка

б) 1, 2 – розчинники; 3, 4 – реактори; 5, 6 – промивники;
7, 8 – центрифуги; 9, 10 – сушарки

Рис.3.2. Технологічна схема (а) та представлена ТО ХТС (б) виробництва сульфату барію

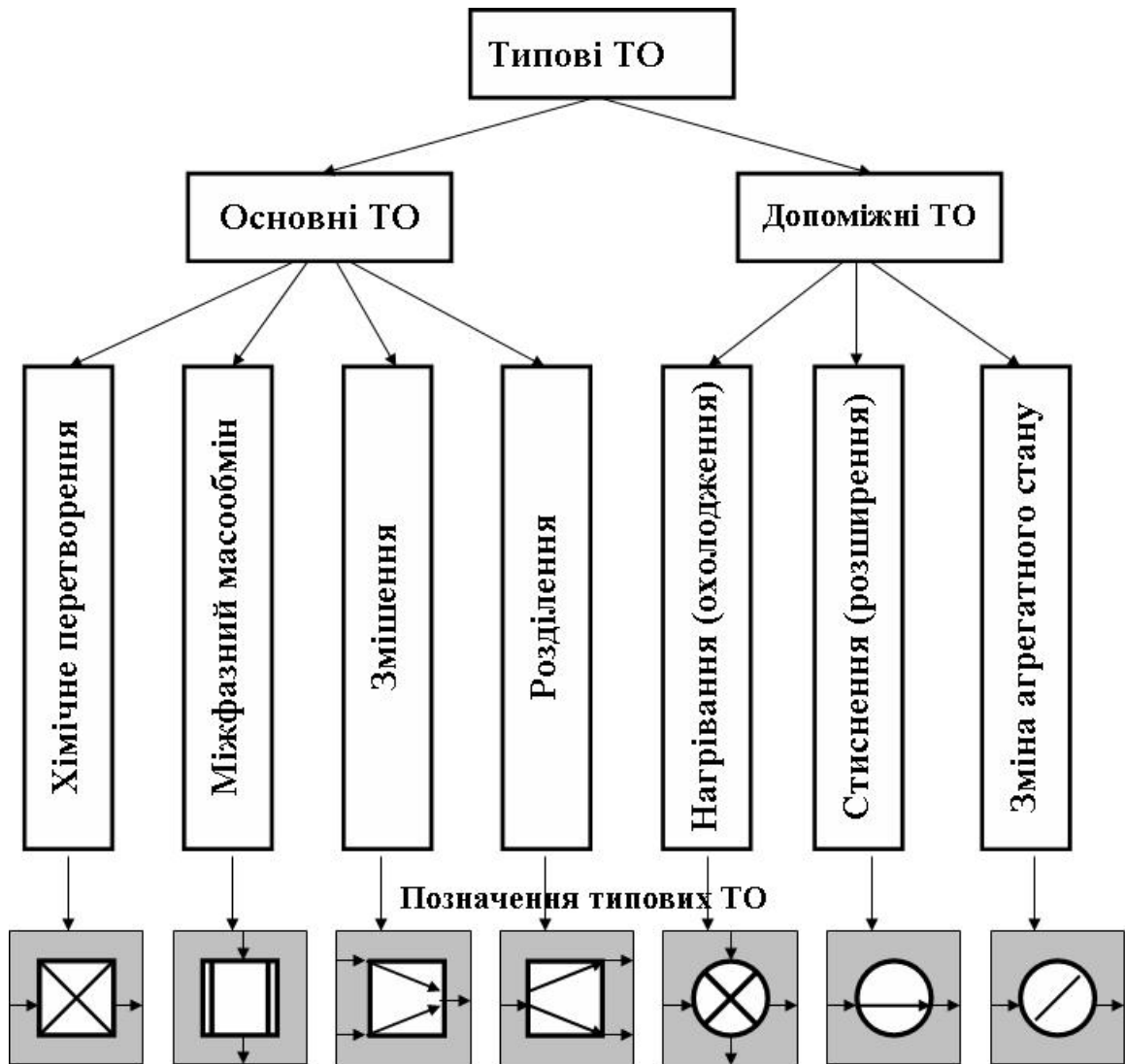


Рис.3.3. Класифікація типових операторів

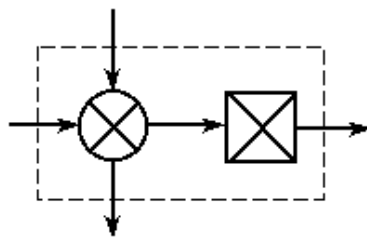


Рис.3.4. Хімічний реактор як сукупність двох типових операторів

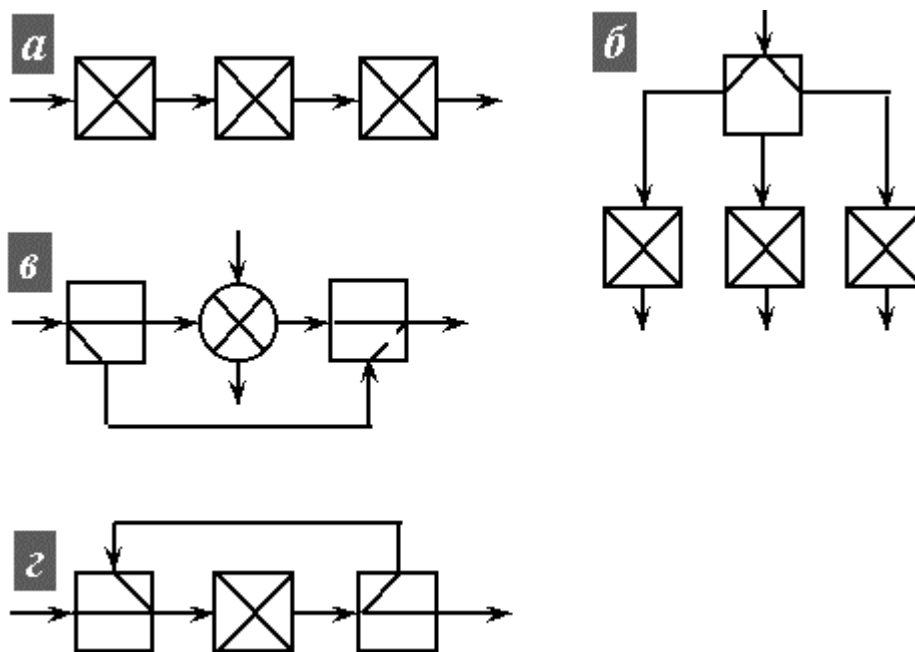
Елемент ХТС називають вихідним, якщо він має вихідний потік, який не подається ні в один із елементів цієї системи. Інші елементи ХТС називають проміжними.

Все, що знаходиться за межею ХТС, являється по відношенню до неї так званім зовнішнім середовищем.

3.3. Технологічна структура хіміко-технологічних систем

Для ХТС характерні наступні типи технологічних зв'язків між елементами: послідовні, паралельні, послідовно-обвідні (байпас) та зворотні (рециклічні).

Послідовний технологічний зв'язок – це такий зв'язок (рис.3.5 а), коли вихідний потік із одного елемента являється вхідним для наступного, і всі технологічні потоки проходять через кожний елемент системи не більше одного разу. Послідовне сполучення елементів відповідає багатоступінчастому принципу переробки хімічної сировини в послідовності апаратів, що якісно відрізняються, і є основним прийомом у хімічній технології. Іноді з метою підвищення ступеня перетворення вихідної сировини, виходу цільового продукту реалізують послідовне сполучення однотипних апаратів.



а – послідовний; б – паралельний;
в – послідовно-обвідний (байпас); г – зворотній (рециклічний)

Рис.3.5. Типи технологічних зв'язків

Паралельний технологічний зв'язок – це такий зв'язок, коли вихідний із i -го елемента ХТС потік, розбивається на кілька паралельних підпотоків (рис.3.5 б). Паралельний технологічний зв'язок застосовується для підвищення потужності ХТС, а також при паралельному отриманні на базі однієї початкової речовини двох або кількох продуктів.

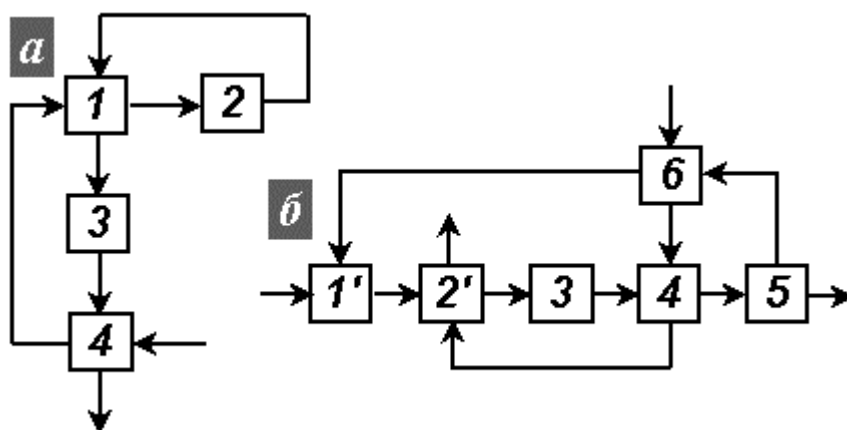
Послідовно-обвідний технологічний зв'язок (байпас) – це такий технологічний зв'язок, при застосуванні якого частина вихідного потоку із одного елемента обминає деякі елементи ХТС в послідовному ланцюгу апаратів, а потім знову об'єднується з основним потоком. Прикладом такого зв'язку являється ланцюг апаратів: розподільник потоків, теплообмінник, змішувач потоків (рис.3.5 в) для регулювання температури на виході із теплообмінного вузла. Побічний потік не зазнає хімічних перетворень і характеризується високою концентрацією вихідної речовини. Змішування його з

головним потоком дозволяє підвищити концентрацію вихідного реагенту і зменшити температуру до величини, оптимальної для наступного елемента ХТС.

Зворотній технологічний зв'язок (рис.3.5 г) характеризується наявністю рециркуляційного потоку, який з'єднує вихід наступного елемента ХТС з входом попереднього. Зворотній технологічний зв'язок передбачає багаторазове повернення потоків в один і той же елемент системи. Типовими прикладами ХТС із зворотними зв'язками є ХТС синтезу метанолу, аміаку, сульфату барію, гідроочищення дизельного пального, сульфурвання нафталіну.

Звичайно в ХТС зустрічаються комбінації розглянутих типових зв'язків.

За особливостями технологічної структури ХТС виділяють два типи розімкнені та замкнені. В розімкнених ХТС технологічні потоки проходять через будь-який елемент системи тільки один раз. Замкненими називають ХТС, які мають хоча б один зворотній технологічний зв'язок потоків маси (див.рис.3.5 г), енергії (рис.3.6 а) або комбіновану (рис.3.6 б).



a – по потоках енергії; *б* – комбінована; 1, 4, 6 – теплообмінники;
2, 3 – реактори; 5 – сепаратор; 1' – змішувач; 2' – компресор.

Рис. 3.6. Замкнена хіміко-технологічна система

3.4. Класифікація змінних величин, які характеризують роботу хіміко-технологічних систем

Розглянемо ХТС, зображену на рис.3.7.

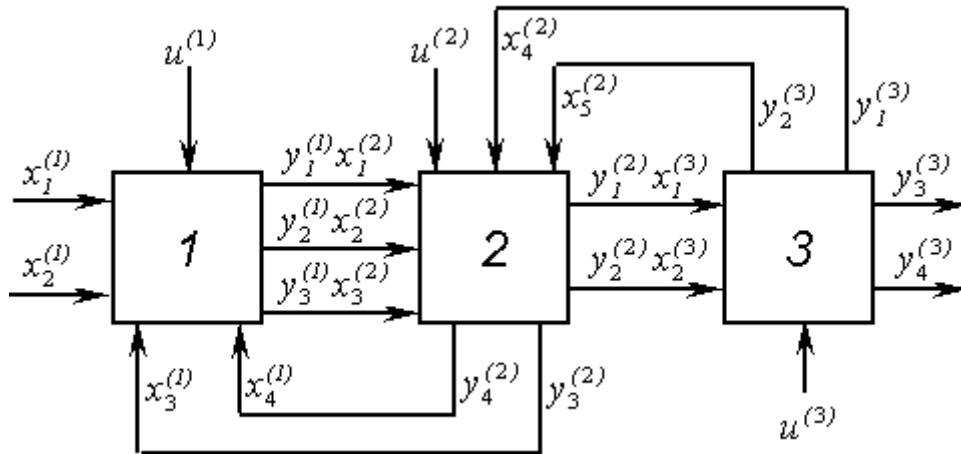


Рис. 3.7. Приклад, що ілюструє класифікацію змінних величин, які характеризують роботу хіміко-технологічної системи

Величини:

$$X^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_m^{(k)})$$

$$Y^{(k)} = (y_1^{(k)}, y_2^{(k)}, \dots, y_n^{(k)})$$

$$U^{(k)} = (u_1^{(k)}, u_2^{(k)}, \dots, u_r^{(k)})$$

представляють собою вектори вхідних, вихідних змінних та керувань k -го елемента ХТС.

Вхідні змінні елементів ХТС, які не можуть бути вихідними змінними інших елементів, будемо називати вхідними параметрами даної ХТС (змінні $x_1^{(1)}$, $x_2^{(1)}$ на рис. 3.7), вихідні змінні елементів ХТС, які не можуть бути вхідними змінними ніяких інших елементів – вихідні змінні $y_3^{(3)}$, $y_4^{(3)}$, а інші – проміжні.

Потоки ХТС можна характеризувати векторними величинами, які показують витрату, температуру, тиск та склад середовища. В цьому випадку зв'язок між елементами на схемі показують однією лінією. Скалярна величина, яка чисельно дорівнює кількості параметрів стану потоків, називається параметричністю.

Зв'язки між елементами ХТС задають такими відношеннями

$$x_i^{(k)} = y_j^{(h)} \tag{3.2}$$

де i -а вхідна змінна k -го блоку є одночасно j -ою вихідною змінною h -го блоку. Ці рівняння описують структуру ХТС.

Наприклад, структуру розглянутої ХТС задають такими рівняннями:

$$\begin{aligned}x_1^{(2)} &= y_1^{(1)}; x_2^{(2)} = y_2^{(1)}; x_3^{(2)} = y_3^{(1)} \\x_4^{(2)} &= y_1^{(3)}; x_5^{(2)} = y_2^{(3)}; x_3^{(1)} = y_3^{(2)} \\x_4^{(1)} &= y_4^{(2)}; x_1^{(3)} = y_1^{(2)}; x_2^{(3)} = y_2^{(2)}\end{aligned}\tag{3.3}$$

Математичні описи елементів ХТС мають вигляд:

$$y_i^{(k)} = f_i^{(k)}(x_1^{(k)}, \dots, x_m^{(k)}, u_1^{(k)}, \dots, u_r^{(k)})\tag{3.4}$$

де $i = 1(1)n$; $k = 1(1)N$; N – число елементів в системі.

Система рівнянь технологічних зв'язків елементів ХТС (3.3) разом з математичними описами окремих елементів системи (3.4) представляє собою математичну модель ХТС.

Всі змінні, які входять до рівнянь (3.3) та (3.4), називаються інформаційними. Інформаційні змінні розділяють на проектні (задані) та розрахункові (шукані). Серед проектних змінних виділяють регламентовані та оптимізуючі змінні ХТС.

До регламентованих змінних відносять технологічні параметри (параметри стану потоків: витрата; тиск; температура; склад; активність каталізатора; густина зрошення в абсорбері; флегмове число в ректифікаційній колоні та ін.) та конструктивні параметри елементів (конструктивний тип апаратів, їх розмір, кількість). Регламентовані змінні знаходять за даними проектного завдання.

Змінні, значення яких можна змінювати при заданих значеннях регламентованих змінних з метою знаходження оптимального режиму роботи ХТС, називають оптимізуючими.

Необхідно зазначити, що в якості довільних (незалежних змінних) із всієї множини інформаційних змінних можуть бути вибрані тільки проектні змінні ХТС.

Різниця між числом інформаційних змінних та числом інформаційних зв'язків або умов, які існують між змінними, називають числом ступенів свободи ХТС L_f . Воно представляє собою число довільних змінних, які можна змінювати при оптимізації ХТС.

3.5. Властивості хіміко-технологічних систем

ХТС має сукупність властивостей, на які необхідно зважати при проектуванні нового або реконструкції діючого виробництва. Розглянемо деякі основні властивості ХТС.

Чутливість ХТС до зовнішніх та внутрішніх збурень – це здатність системи реагувати на них, тобто змінювати параметри стану. Бажано, щоб система була малочутливою до збурень.

Керованість ХТС – це властивість системи досягати мети керування. Звичайно мета керування – випуск заданої кількості продукції необхідної якості. Для забезпечення потрібної керованості необхідно здійснювати спільне проектування ХТС та відповідної системи керування.

Надійність системи – це її властивість зберігати працездатність протягом заданого часу функціонування. Ненадійність системи проявляється в частковій або повній втраті нею працездатності. При розробці нових ХТС необхідно вже на етапі проектування забезпечити їх високу експлуатаційну надійність.

Перешкодозахищеність – це властивість ХТС ефективно протистояти внутрішнім та зовнішнім збуренням.

Стійкість – це спроможність ХТС повертатися до початкового стаціонарного стану після усунення збурень, які викликали вихід системи із цього стану.

Така властивість ХТС, як складність, визначається складністю процесів, які в ній відбуваються, числом елементів, які входять до її складу, числом та видами зв'язків між елементами і т.д.

Завдяки об'єднанню елементів в систему, вона набуває нових якостей, якими не володіють окремі елементи. Цю властивість системи називають емерджентністю. ХТС забезпечує випуск товарної продукції, в той час як ні один із її елементів, окремо взятий, не може виконувати цю задачу.

Елементи, які утворюють ХТС, взаємозв'язані та, завдяки цьому, впливають один на одного. Цей взаємовплив зумовлює властивість системи, яка зветься інтеректністю.

Всі перелічені властивості слід враховувати при розробці систем автоматизованого проектування ХТС.

3.6. Ієрархія підсистем хіміко-технологічних систем

Сучасне хімічне виробництво можна розглядати як складну ХТС, яка містить взаємопов'язані складові частини – підсистеми, які відповідають різним рівням складності. Сукупність рівней, на яких розташовані підсистеми ХТС, називають ієрархією.

Підсистеми першого (нижнього) рівня – це машини та апарати. Другий рівень ієрархії утворюють сукупності машин та апаратів в масштаб цеха. Третій рівень – це сукупність цехів в масштабі виробництва товарної продукції. Нарешті, четвертий рівень утворюють сукупності виробництв в межах заводу або комбінату.

Слід відзначити, що вказана ієрархія підсистем характерна, в основному, задачам розрахунку ХТС. Так, на стадії проектування та конструювання машин та апаратів вони, в свою чергу, можуть розглядатися як складні системи, що складаються із більш простих підсистем.

Будь-яка підсистема, яка входить до складу ХТС, має певне призначення. Якість функціонування підсистеми оцінюється у відповідності до сукупності вимог до її роботи.

3.7. Задачі, які розв'язують при проектуванні хіміко-технологічних систем

Серед різноманітних математичних задач, пов'язаних з розробкою нових та удосконаленням існуючих ХТС, слід особливо виділити задачі синтезу, аналізу та оптимізації.

Задача синтезу ХТС в загальному випадку формулюється таким чином. Задано елементи, із яких може бути побудована система, а також сировина та цільовий продукт. Потрібно розробити структуру ХТС для реалізації технологічного процесу, тобто необхідно вибрати елементи з числа наявних; встановити зв'язок між ними; визначити конструктивні та технологічні параметри елементів ХТС.

Задача синтезу звичайно багатоваріантна, бо одні і ті ж значення вихідних параметрів ХТС можуть бути забезпечені при різній структурі системи та різних режимах функціонування її елементів.

Задача синтезу має певні особливості при проектуванні нової та реконструкції існуючої ХТС. Так, при створенні нової ХТС звичайно є багато можливостей вибору елементів та зв'язків між ними. При реконструкції ХТС доводиться зберігати всі або частину її елементів, а також всі або частину зв'язків між елементами.

Задачі аналізу ХТС поділяють на аналіз структури та якості функціонування.

Мета аналізу структури ХТС – виявлення її структурних особливостей та знаходження послідовності розрахунку елементів, а мета аналізу якості функціонування ХТС – отримання кількісних оцінок її основних властивостей: чутливість, надійність, стійкість і т.д.

Задача оптимізації ХТС являється комплексною. Вона включає в себе як оптимізацію структури, так і оптимізацію режимів функціонування елементів. Мета оптимізації – забезпечення найбільш високих техніко-економічних показників ХТС.

Слід відзначити зв'язок, який існує між задачами оптимізації, синтезу та аналізу. При створенні нового виробництва виконується синтез кількох альтернативних варіантів ХТС, проводять аналіз їх техніко-економічних показників, відбувається пошук кінцевого оптимального варіанту.

Для рішення цих задач широко використовуються різні методи розрахунку ХТС, які розглядаються в наступних розділах.

3.8. Запитання та завдання для самоперевірки

1. Поясніть цілі і завдання аналізу й синтезу ХТС.
2. Що є об'єктом оптимізації в хімічній технології?
3. Які цілі визначають зміст оптимізації ХТС?
4. Дайте визначення ХТС і складових частин її ієрархічної структури.
5. Опишіть основні властивості ХТС.
6. Дайте характеристику основних змінних величин, що відображають роботу ХТС.
7. Як оцінюють якість функціонування ХТС?
8. Які типові схеми сполучення технологічних операторів існують у ХТС?

Розділ 4. Задачі системного аналізу для об'єктів
типу складних хіміко-технологічних систем

4.1. Моделювання хіміко-технологічних процесів та систем

Розрізняють два види математичних моделей хіміко-технологічних процесів:

Детерміновані (аналітичні) математичні моделі, побудовані на основі фізико-хімічної сутності процесів.

Статистичні (емпіричні) моделі, отримані у вигляді рівнянь лінійної (або не-) множинної регресії на основі обробки експериментальних даних. Вони встановлюють співвідношення між вхідними й вихідними параметрами елемента ХТС, але не відображають сутність фізико-хімічних процесів.

Фізико-хімічні моделі більше універсальні, але і як правило більше складні (системи диференціальних рівнянь).

Вони складаються із трьох груп рівнянь:

1. Балансові рівняння (для речовини, енергії, імпульсу);
2. Кінетичні рівняння (хімічна кінетика, кінетика масообміну й теплопереносу);
3. Рівнянь стану (фазові рівноваги).

Для багатьох задач припустиме й необхідне спрощення складних моделей:

- одержання лінійних моделей;
- урахування тільки балансових рівнянь.

Хоча балансові моделі дуже прості, вони досить інформативні. З їхньою допомогою можна одержати таку інформацію:

- загальна кількість необхідної сировини, енергії, допоміжних речовин;
- загальна кількість цільового продукту, побічних продуктів, вторинних енергоресурсів;
- питомі норми витрат (кількість сировини або енергії на одиницю продукту);
- зразкову собівартість продукту, оскільки витрати на сировину й енергоресурси в хім. промисловості становлять 90% загальної собівартості;
- оцінку головних витрат і вузьких місць процесу шляхом зіставлення розрахованих видаткових коефіцієнтів з теоретичними.

При можливості проведення експерименту на діючій ХТС (або пілотній установці) відкривається шлях до визначення параметрів моделі. Складання математичних моделей на основі активного або пасивного експерименту може здійснюватися за допомогою регресійного або кореляційного аналізу. Для проведення активних експериментів доцільно використати методи планування експерименту.

Основна задача розрахунку матеріальних та теплових балансів (МТБ) ХТС – знаходження параметрів стану потоків технологічної схеми: загальних та покомпонентних витрат; складу потоків, температур та ентальпії.

Методи вирішення цієї задачі можна поділити на дві групи: інтегральні та декомпозиційні.

Суть інтегральних методів розрахунку ХТС міститься в об'єднанні систем рівнянь, які описують роботу окремих апаратів, в одну велику систему рівнянь та рішень цієї системи. До недоліків цієї групи методів слід віднести:

- велику розмірність єдиної системи рівнянь;
- унікальність кожної системи рівнянь, що відповідає специфіці

розрахованої ХТС.

Перший недолік зумовлений тим, що до реальної ХТС входить багато апаратів, кожний із яких описується порівняно невеликою системою рівнянь. Проте сумарна розмірність єдиної системи рівнянь виходить настільки великою, що отриману систему не завжди вдається розв'язати на сучасних ЕОМ.

Другий недолік – не повторюваність систем рівнянь – викликає необхідність при вирішенні задачі на ЕОМ або складати кожний раз заново програму обчислення, або проводити вручну велику підготовчу роботу. При цьому досить складно автоматизувати вирішення задачі розрахунку хіміко-технологічної системи.

Суть декомпозиційних методів розрахунку полягає в тому, що кожний апарат або групу апаратів розраховують окремо, а розрахунок всієї ХТС складається із послідовності розрахунків окремих апаратів. При цьому розмірність кожної окремої системи рівнянь невелика, оскільки розраховується кожний раз тільки один апарат. Окрім цього, типів апаратів порівняно небагато. Отже, можна заздалегідь скласти підпрограми для розрахунку окремих апаратів і з цих підпрограм (модулів) скласти програму розрахунку всієї ХТС, т.ч. автоматизувати процес розрахунку. В цьому розумінні декомпозиційні методи мають значною перевагу перед інтегральним. Інтегральні та декомпозиційні методи поділяють на ітераційні та безітераційні.

4.2. Моделювання структури ХТС із використанням теорії графів

Структуру ХТС звичайно розглядають в термінах теорії графів: ХТС зображують у вигляді орієнтованого графа, вершини якого відповідають апаратам, а дуги - потокам (рис.3.1). Послідовність зчеплених дуг, яка дозволяє пройти із однієї вершини в іншу, називають шляхом. Так, в графі шляхом буде послідовність дуг (1, 2), (2, 3), (3, 4), (4, 3). Шлях можна також позначати послідовністю вершин, яка їх утримує, наприклад, 1, 2, 3, 4, 3 або 1, 2, 3, 4, 2.

Шлях, початкова вершина якого співпадає з кінцевою, причому кожна вершина, за винятком початкової, проходиться тільки один раз, називається контуром. В розглянутому графі можна виділити такі контури: (2, 3, 4, 2), (3, 4, 3), (6, 7, 6).

Комплексом називається частина графа, вершини якого мають такі властивості:

- кожна із вершин та дуг комплексу входить в один із контурів графа;
- якщо вершина i входить в комплекс, то в цей комплекс входять також всі вершини, що входять в контур, які містять вершину i .

Наприклад, в графі на рис. 4.1 сукупності вершин 2, 3, 4, та 6, 7 являють собою комплекси, оскільки всі вершини мають вказані дві властивості. Проте сукупність вершин 1, 2, 3, 4, 5 не є комплексом, тому що вершини 1 та 5 не входять не в один із контурів.

Можна також дати таке визначення комплексу: комплексом графа $T\{X, Q\}$ будемо називати такий граф $T_1\{X_1, Q_1\}$ у якого $X_1 \subset X$, $Q_1 \subset Q$, причому:

- для будь-яких вершин $x_i, x_j \in X_1$ існує шлях із x_i в x_j та із x_j в x_i ;
- для будь-яких вершин $x_i \in X_1$ та $x_j \notin X_1$ не існує одночасно шляхів із x_i в x_j та із x_j в x_i ;
- дуга належить Q_1 в том випадку, якщо обидві вершини, які з'єднуються нею, належать X_1 .

Розглянемо окрему вершину x_i . Дуги, які в неї входять, називаються вхідними, а ті, які виходять із x_i – вихідними. Вершину x_i будемо називати роз'єднувальною, якщо вона має більш ніж одну вихідну дугу (наприклад, такою є вершина 1). Вершину x_i

будемо називати об'єднувальною, якщо вона має більш ніж одну вхідну дугу. Вершину x_j називають позитивно-інцидентною (п.-і.) вершині x_i , якщо існує дуга (x_i, x_j) . Вершину x_i називають негативно-інцидентною (н.-і.) вершині x_j , якщо існує дуга (x_i, x_j) .

На рис.4.1 вершини 3 та 5 позитивно-інцидентні вершині 4, тому що існують дуги 4-5 та 4-3, вершина 1 негативно-інцидентна вершинам 2 та 5, тому що існують дуги 1-2 та 1-5.

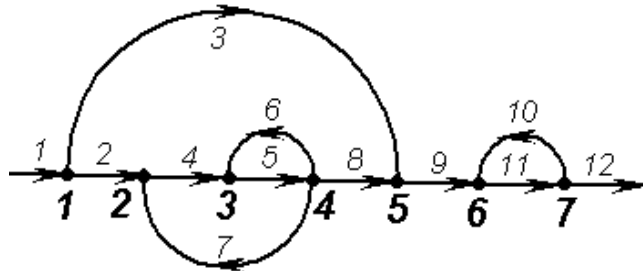


Рис. 4.1. Орієнтований граф

Інформація, яка міститься в графі, може бути подана у вигляді різних матриць. Зв'язок графа та матриці має важливе значення, тому що дозволяє перекласти графічну інформацію (структурні особливості системи) на мову чисел, які фігурують в математичних рівняннях. При вирішенні різних задач структурного аналізу використовуються різні зображення одного і того ж графа.

Матриця суміжності - це таблиця, в якій число строчок та стовпчиків дорівнює числу вершин графа. Якщо в початковому графі є дуга із i -ї вершини в j -у, тоді елемент a_{ij} матриці суміжності дорівнює 1, в протилежному випадку - 0. Для графа на рис. 4.1 матриця суміжності $[A]$ має вигляд:

$$[A] = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

$$[A_1] = \begin{matrix} & \begin{matrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Іноді цю таблицю доповнюють нульовим стовпчиком та нульовою строчкою, розуміючи під нульовою вершиною зовнішнє середовище:

Список суміжності - це матриця розміру $m \times 2$ (або $2 \times m$), де m - число дуг в графі. В кожному стовпчику в першому рядку вказується номер вершини, із якої виходить i -а дуга, а в другому рядку - номер вершини, в яку i -а дуга входить.

Список суміжності $[S]$ для графа на рис.4.1 може бути записаний у вигляді:

$$[S] = \left| \begin{array}{cccccccc} 1 & 1 & 2 & 3 & 4 & 4 & 4 & 5 & 7 & 6 \\ 2 & 5 & 3 & 4 & 3 & 2 & 5 & 6 & 6 & 7 \end{array} \right|$$

4.3. Моделювання статичних режимів ХТС на основі обчислення матеріальних та теплових балансів

В ХТС виділяють фізичні потоки двох видів: технологічні (вони забезпечують взаємозв'язок елементів між собою та взаємодію між системою і навколишнім середовищем) та умовні – це розсіювання (втрати) речовини або енергії в навколишнє середовище, а також внутрішні джерела (стоки) речовини та енергії.

Внутрішні джерела (стоки) речовини та енергії відображають ефекти хімічних та фізичних перетворень, які відбуваються всередині елементів ХТС. Кожному внутрішньому джерелу (стоку) речовини відповідає фіктивний матеріальний потік, а кожному внутрішньому джерелу (стоку) теплоти – фіктивний тепловий потік.

Перетворення вхідних потоків на вихідні (4.1) підкоряються законам збереження маси та енергії, тобто. для кожного елемента ХТС може бути записана система рівнянь МТБ, яка включає в себе наступні незалежні рівняння:

– матеріальний баланс по загальній масовій витраті речовини:

$$\sum_{i=1}^n G_i = 0 \quad (4.1)$$

– матеріальний баланс по масових витратах компонентів:

$$\sum_{i=1}^n G_i c_{ij} + \sum_{k=1}^m G_k^* = 0; j = 1(1)p \quad (4.2)$$

– тепловий баланс:

$$\sum_{i=1}^n G_i C_{p_i} t_i + \sum_{k=1}^m Q_k^* = 0 \quad (4.3)$$

де G_i – масова витрата речовини i -го потоку; c_{ij} – доля j -го компонента в одиниці загальної витрати речовини (p – число компонентів); G_k^* – масова витрата k -го фіктивного потоку; C_{p_i} – середня питома теплоємність; t_i – температура; Q_k^* – витрата теплоти k -го теплового фіктивного потоку.

При відомих значеннях загальної витрати, температури та складу всіх потоків технологічної схеми із рівнянь (4.1) – (4.3) легко визначити теплові навантаження та масові покомпонентні витрати кожного елемента ХТС.

Існує два варіанти формулювання задачі розрахунку параметрів стану технологічних потоків ХТС:

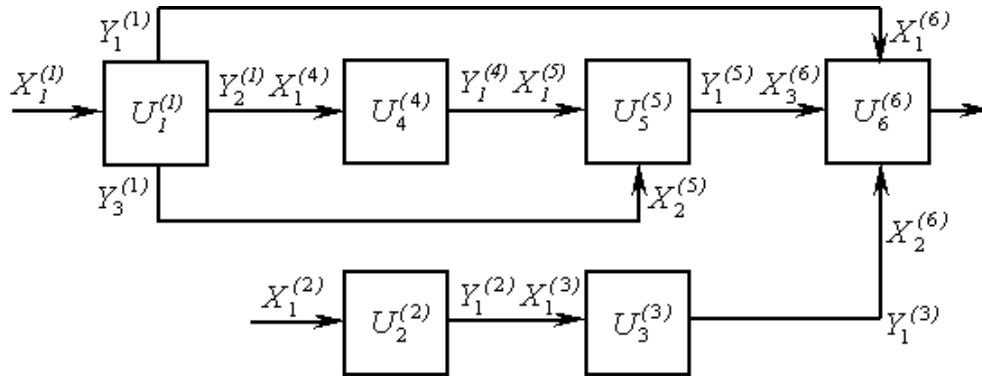
- при заданому наборі змінних вхідних потоків системи та керуючих параметрів кожного елемента ХТС необхідно обчислити значення змінних проміжних та вихідних потоків;
- при заданих значеннях керуючих параметрів та деяких вхідних, проміжних і вихідних змінних потрібно розрахувати інші змінні усіх технологічних потоків системи.

Розглянемо спочатку перший спосіб завдання початкових даних для розрахунку параметрів стану потоків ХТС.

В цьому випадку загальне число інформаційних зв'язків ХТС дорівнює $M_1 + M_2$, де M_1 – число рівнянь, які описують залежність між вихідними та вхідними змінними усіх елементів ХТС, M_2 – число рівнянь, які задають значення вхідних та керуючих змінних – початкові дані.

Загальна кількість змінних ХТС: $N = N_1 + N_2 + N_3$, де N_1 – число вихідних та проміжних змінних ХТС; N_2 – число вхідних змінних ХТС; N_3 – число керувань. Очевидно, що $M_1 = N_1$, $M_2 = N_2 + N_3$, тобто число ступенів свободи при першому способі завдання початкових даних завжди дорівнює нулю.

Розрахунок параметрів стану розімкненої схеми зводиться до послідовного однократного розрахунку елементів ХТС відповідно до рівнянь (4.1) та (4.2). Наприклад, для схеми (рис.4.2), заданими являються значення параметрів векторів вхідних потоків $X_1^{(1)}$, $X_1^{(2)}$ та значення параметрів векторів керувань U_1, U_2, \dots, U_6 . З рівняння (4.2) можна знайти $Y_1^{(1)}$, $Y_2^{(1)}$, $Y_3^{(1)}$. Для цього можуть бути використані спеціальні обчислювальні блоки (програмні модулі, наприклад, підпрограми або процедури), призначення яких – визначення вектора Y по відомих векторах X та U . У відповідності з (2.2), $X_1^{(4)} = Y_2^{(1)}$. Тому можна розрахувати $Y_1^{(4)}$, а потім аналогічно знайти параметри стану потоків елементів 5, 2, 3 і 6.



X_i^k – вектор параметрів стану i -го вхідного потоку k -го блока;
 Y_j^l – вектор параметрів стану j -го вихідного потоку l -го блока

Рис. 4.2. Розімкнена схема

Розрахунок замкнених схем ґрунтується на розриві зворотних зв'язків. В схемі на рис.4.3 можна розірвати, наприклад, потоки 1, 2, 3 і, таким чином, отримати розімкнену схему. При розриві p -го потоку, який зв'язує k -й блок з l -м, вектор змінних після розриву будемо позначати через X_p^* , а вектор змінних до розриву Y_p^* . Для відповідності режиму в розімкненій схемі режиму в замкненій схемі необхідно, щоб для кожного “розірваного” потоку виконувалось рівняння:

$$X_p^* = Y_p^*; p = 1, 2, \dots, m \quad (4.4)$$

де m - число “розірваних” потоків.

Вектори Y_p^* ($p = 1, 2, 3$) на рис. 4.4 а являються деякими функціями X_p^* :

$$Y_p^* = \varphi_p(X_1^*, \dots, X_p^*) \quad (4.5)$$

Підставивши (4.5) в (4.4), отримаємо систему нелінійних рівнянь:

$$X_p^* = \varphi_p(X_1^*, \dots, X_p^*) \quad (4.6)$$

Більш зручно цю систему показати у вигляді:

$$F_p^*(X_1^*, X_2^*, \dots, X_p^*) = 0; p = 1, 2, 3 \quad (4.7)$$

Якщо параметричність усіх потоків однакова і дорівнює m , то для розрахунку схеми (рис. 4.4 а) необхідно розв'язати систему нелінійних рівнянь, порядок якої дорівнює $3m$. При цьому на кожній ітерації для визначення лівих частин рівняння (4.7) необхідно розраховувати розімкнену схему рис. 4.4,а в такій послідовності: {1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9}.

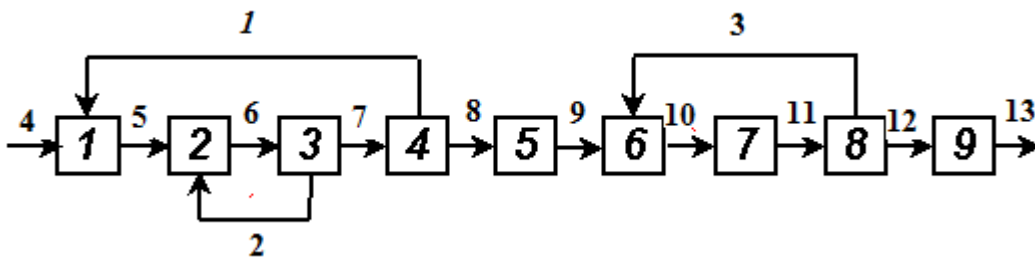


Рис. 4.3. Замкнена схема

Для вирішення системи лінійних рівнянь можуть бути використанні різні методи: Ньютона; простий або модифікований ітерації. Для зменшення затрат машинного часу на обчислення лівих частин системи рівнянь (4.7) застосовуються квазі'ютонівські методи.

Систему рівнянь (4.7) можна скоротити. Покажемо це на прикладі схеми рис. 2.3 б. Спочатку розраховується сукупність блоків 3, 4, 1, 2; незалежність їх розрахунку бачимо із рис. 4.4. Іншими словами, розв'язується система рівнянь:

$$X_6^* = \varphi(X_6^*) \quad (4.8)$$

Після цього розраховується блок 5, а потім знову сукупність блоків 6, 7, 8 і блок 9. Розрахунок сукупності блоків 6, 7, 8 еквівалентний рішенням системи:

$$X_3^* = \varphi(X_3^*) \quad (4.9)$$

В результаті рішення однієї системи рівнянь порядку $3m$ ми замінили рішенням двох систем порядку m .

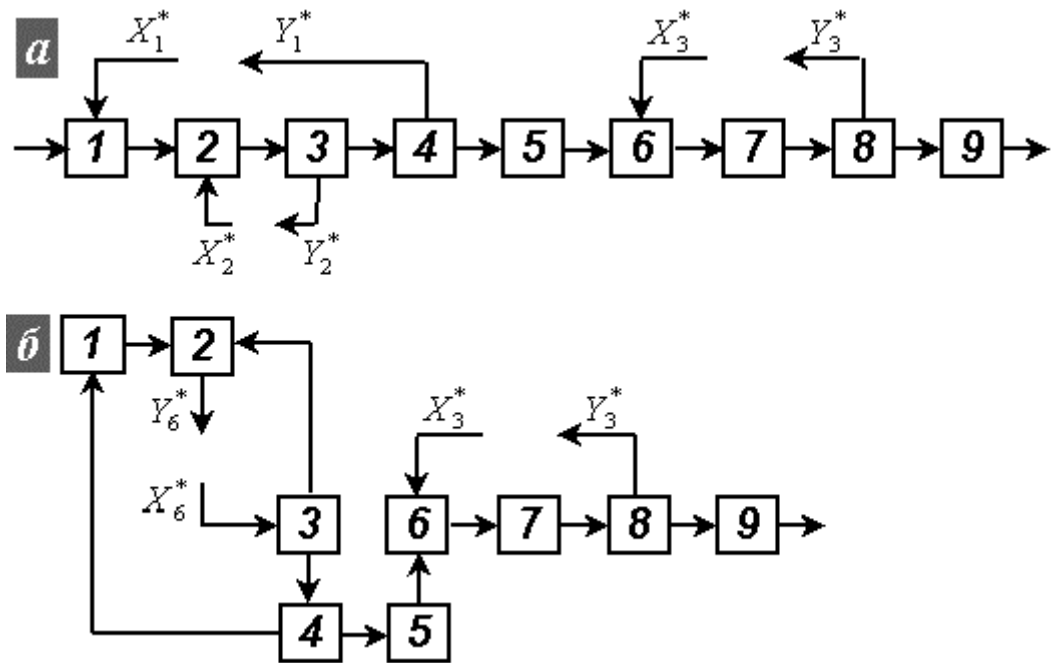


Рис. 4.4. Варіанти розімкненої схеми, які відповідають замкненій схемі, яка приведена на рис. 4.3

Таким чином, безпосередньо перед розрахунком ХТС необхідно провести аналіз її структури, який полягає у виділенні комплексів, т.ч. сукупностей елементів ХТС, які розраховуються спільно, визначенні оптимальної множини розірваних потоків та визначенні послідовності розрахунку одержаної розімкненої схеми. Методи аналізу структури розглянуті в розділі 4.5.

При другому варіанті завдання початкових даних, коли задані керування та якісь проміжні, вхідні та вихідні змінні, задача формалізації розрахунку ХТС ускладнюється. Вирішення цієї задачі розглянемо на наступному прикладі.

Початкова тверда речовина поступає в апарат-розчинник 1 (рис. 4.5), де проходить її розчинення у воді. Концентрація речовини A на виході із розчинника задана (регламентована змінна). Розчин поступає в реактор 2, де проходить його взаємодія з речовиною B . В результаті реакції утворюється речовина, яка випадає в осад. Речовину A подають в реактор в надлишку, тому на виході із нього речовина B відсутня. Суспензія поступає в перший фільтр 3, після чого фільтрат спрямовують на подальшу переробку, а осад – на відмивку від речовини A у промивник 4 і потім на другий фільтр 5. Фільтрат після підживлення свіжою водою у змішувачі 6 повертається в апарат-розчинник 1. Із проектного завдання відомі керування елементів ХТС, параметри стану потоків 1 та 8, а також склад компонента A в осаді на виході із другого фільтру.

Потрібно розрахувати завдання витрат та концентрацій компонентів у всіх потоках технологічної схеми.

Перед розрахунком схеми необхідно перевірити умову рівності нулю числа ступенів свободи системи $DF(Degree\ of\ Freedom)$.

При першому варіанті постановки задачі $DF = 0$. Якщо додатково задано n проміжних або вихідних змінних системи, то таке ж число вхідних змінних повинно бути розрахунковими.

У нашому прикладі маємо дві задані проміжні та вихідні змінні (концентрація компонента A на виході із розчинника та його вміст в осаді). В той же час дві вхідні змінні (витрата води, яка поступає в промивник, та витрата підживлюючої води) є розрахунковими, тому умову рівності нулю числа ступенів свободи системи дотримано.

Замінімо в розглянутій схемі технологічні зв'язки інформаційними потоками (рис. 4.5 б). У кожному вхідному інформаційному потоці всі змінні задані. Вхідними інформаційними змінними можуть бути як вхідні, так і вихідні змінні елемента ХТС. Для кожного елемента ХТС складаємо обчислювальний блок (модуль), який по відомих вхідних інформаційних змінних обчислює вихідні інформаційні змінні. Задані проміжні та вихідні змінні ХТС стануть вхідними інформаційними змінними, а невідомі вхідні – вихідними (розрахунковими) інформаційними змінними.

Таким чином, на відміну від технологічної схеми, в інформаційній схемі з'являються нові потоки. В тих блоках схеми, в яких з'явилися допоміжні вхідні інформаційні потоки, повинні бути добавлені вихідні інформаційні потоки. Так, наприклад, в апараті-розчиннику 1 задана концентрація компонента A у вихідному потоці. Вона є вхідною інформаційною змінною. Одна із змінних потоку 3 повинна бути вихідною інформаційною змінною, наприклад, витрата G_3 . З рівнянь математичної моделі розчинника, при відомих значеннях G_1 , C_{1A} , C_{1H_2O} , C_{3A} , C_{3H_2O} та C_{2A} можна визначити G_3 , C_{2H_2O} та G_2 :

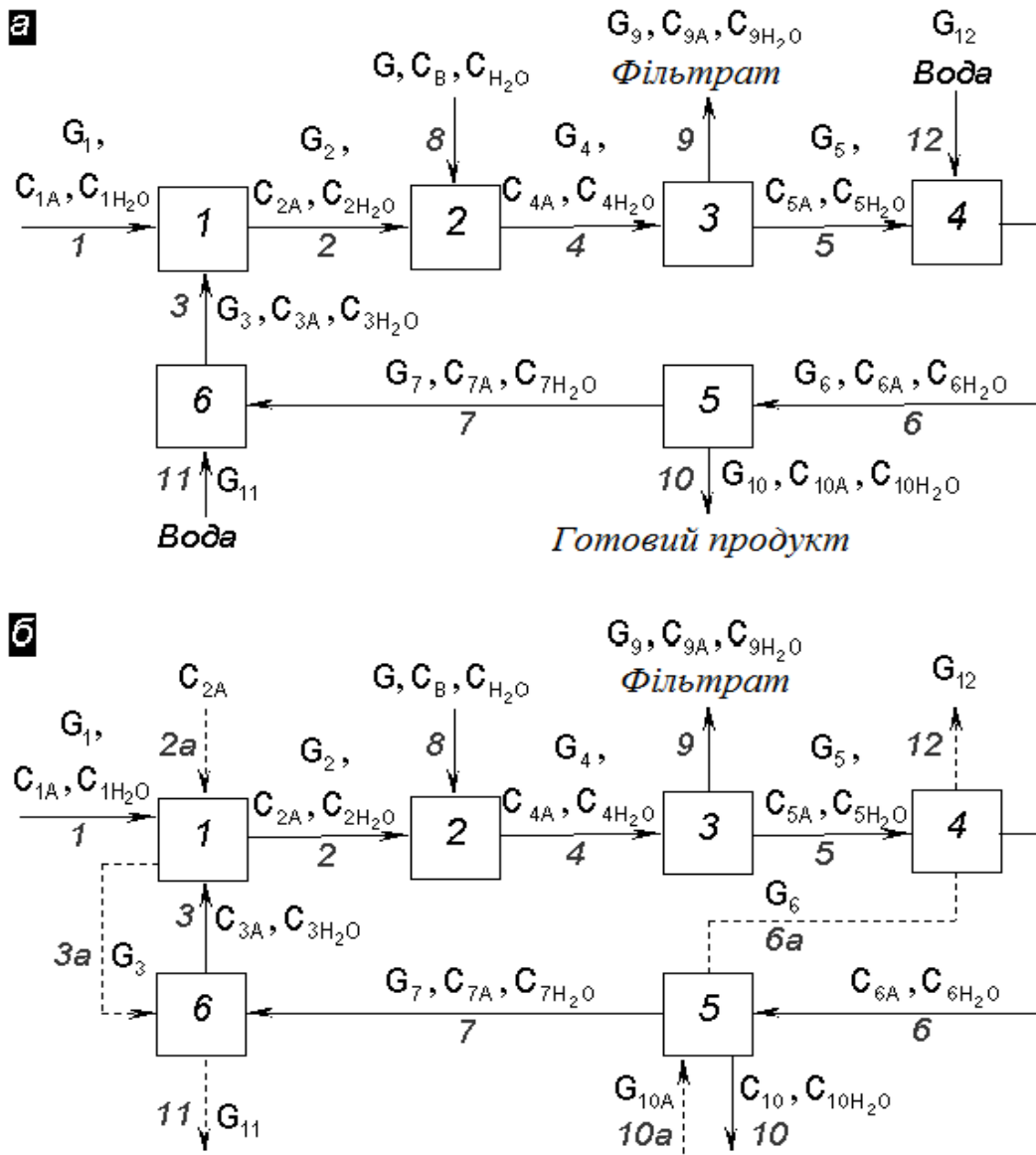
$$G_3 = \frac{G_1(C_{1A} - C_{2A})}{C_{2A} - C_{3A}} \quad (4.10)$$

$$G_2 = G_1 + G_3 \quad (4.11)$$

$$C_{2H_2O} = \frac{G_1 C_{1H_2O} + G_3 C_{3H_2O}}{G_2} \quad (4.12)$$

Якщо розірвати потоки, можна послідовно розрахувати 1 – 6 блоки інформаційної схеми. Потім розв'язується система нелінійних рівнянь відносно змінних у місцях розриву зворотних зв'язків таким способом, як це було описано вище.

Розглянутий метод дуже універсальний та ефективний при розрахунку параметрів стану потоків технологічних схем довільної структури, оцінці чутливості цільової функції проектування до змін деяких параметрів, при оцінці вартості проектної схеми та при оптимізації.



1 – апарат-розчинник; 2 – реактор; 3, 5 – фільтри;
4 – промивник; 6 – змішувач

Рис. 4.5. Хіміко-технологічна схема з технологічними (а) та інформаційними (б) потоками

4.4. Матричний метод розрахунку хіміко-технологічних систем

Якщо залежність між вхідними та вихідними змінними окремого апарату технологічної схеми лінійна, то його математична модель може бути записана в матричній формі:

$$[Y] = [A] \times [X] \quad (4.13)$$

де $[A]$ – матриця перетворення, або операційна матриця, елементи якої відповідають коефіцієнтам функціонального зв'язку між елементами векторів вхідних (x_1, \dots, x_m) та вихідних (y_1, \dots, y_n) змінних даного апарату.

Елементами матриці перетворення $[A]$ можуть бути коефіцієнти поділу, ступінь перетворення, вихід цільового продукту, ККД, ступінь абсорбції та ін., а також коефіцієнти рівняння лінійної регресії.

Принципи побудови операційних матриць розглянуті нижче. Математична модель ХТС може бути одержана об'єднанням матриць перетворення окремих елементів у відповідності з їх технологічною структурою.

Розрахунок ХТС за допомогою операційних матриць зводиться до побудови еквівалентної матриці перетворення системи, яка виражає взаємозв'язок всіх змінних ХТС та може бути записана таким чином:

$$[C] \cdot [X^{(1)}, X^{(2)}, \dots, X^{(k)}, \dots, X^{(n)}, Y_0]^T = 0 \quad (4.14)$$

де X^k – вектор-строчка вхідних змінних k -го апарату; Y_0 – вектор-строчка вихідних змінних системи; $[C]$ – еквівалентна матриця перетворення (або матриця керування зв'язку ХТС), елементи якої відповідають елементам операційних матриць окремих апаратів; n – число апаратів ХТС; T – знак транспонування.

При розрахунку ХТС значення вхідних змінних системи та проектних технологічних та конструктивних параметрів виділяють в самостійний вектор U з відповідною матрицею перетворення $[B_1]$. Так як вихідні змінні системи не впливають на інші параметри, вони можуть розраховуватись окремо після визначення значень проміжних змінних ХТС. Тому математичний опис ХТС можна представити в такому вигляді:

$$[C_1] \cdot [X_1^{(1)}, \dots, X_1^{(k)}, \dots, X_1^{(n)}]^T + [B_1]U = 0 \quad (4.15a)$$

$$[Y] = [C_2] \cdot [X_1^{(1)}, \dots, X_1^{(k)}, \dots, X_1^{(n)}]^T + [B_2]U \quad (4.15b)$$

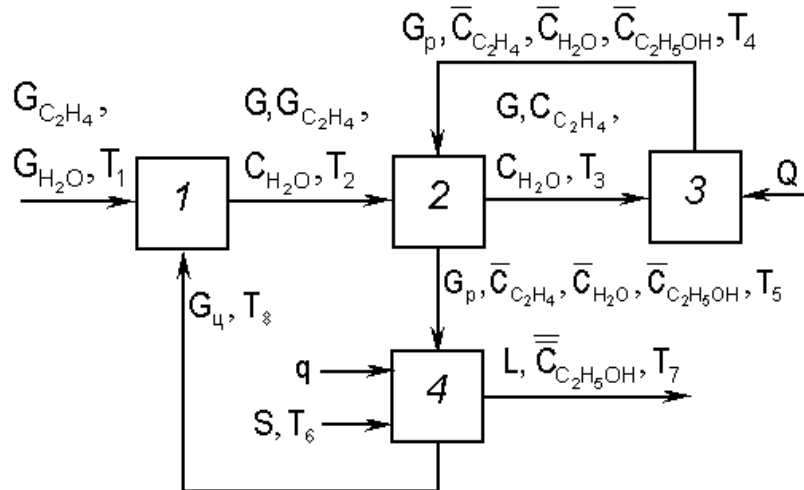
де $[C_1]$, $[C_2]$, $[B_1]$, $[B_2]$ – матриці відповідних рівнянь зв'язку; $X_1^{(k)}$ – вектор-стрічка змінних k -го апарату за виключенням змінних, які входять до вектору U ; U – вектор-стовпчик вхідних змінних ХТС та проектних технологічних і конструктивних параметрів; Y – вектор-рядок вихідних змінних ХТС.

Система рівнянь (4.15) являється лінійною, тому розрахунок ХТС за рівняннями (4.15) не вимагає ітераційного уточнення параметрів стану потоків між апаратами. ХТС розраховують в два прийоми: спочатку, в результаті розв'язку системи лінійних

рівнянь (4.15a) знаходять вектор проміжних змінних, а потім за рівнянням (4.15б) визначають вектор вихідних змінних технологічної схеми.

Побудову матриць $[C_1]$, $[C_2]$, $[B_1]$, $[B_2]$ пояснимо на прикладі спрощеної технологічної схеми отримання етанолу каталітичним окисленням етилену в паровій фазі (рис. 4.6).

В змішувач 1 подають воду, етилен та циркуляційний газ. Одержана газо-водяна суміш нагрівається в теплообміннику 2 за рахунок теплоти реакційної суміші та поступає в трубчатую піч, яка сполучена з реактором 3. В реакторі відбувається гідратація етилену. Реакційна суміш поступає в абсорбер 4, звідки водний розчин етанолу прямує на очистку, а циркуляційний газ – в змішувач 1.



1 – змішувач; 2 – теплообмінник; 3 – реактор; 4 – абсорбер
Рис. 4.6. Спрощена схема отримання етанолу

Математичні моделі окремих елементів ХТС мають вигляд:
змішувач

$$\begin{bmatrix} G \\ C_{C_2H_4} \\ C_{H_2O} \\ T_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G_{C_2H_4} \\ G_{H_2O} \\ G_{\text{Ц}} \\ T_1 \\ T_8 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.16)$$

– теплообмінник

$$\begin{bmatrix} T_3 \\ T_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} & b_{15} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} & b_{25} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G \\ G_P \\ T_2 \\ T_4 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.17)$$

– реактор

$$\begin{bmatrix} G_P \\ \bar{C}_{C_2H_4} \\ \bar{C}_{H_2O} \\ \bar{C}_{C_2H_5OH} \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \\ d_{41} & d_{42} & d_{43} & d_{44} & d_{45} & d_{46} \\ d_{51} & d_{52} & d_{53} & d_{54} & d_{55} & d_{56} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G \\ C_{C_2H_4} \\ C_{H_2O} \\ T_3 \\ Q \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

– абсорбер

$$\begin{bmatrix} G_{\Pi} \\ T_8 \\ L \\ T_7 \\ C_{C_2H_5OH} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} & f_{14} & f_{15} & f_{16} & f_{17} & f_{18} & f_{19} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} & f_{24} & f_{25} & f_{26} & f_{27} & f_{28} & f_{29} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} & f_{34} & f_{35} & f_{36} & f_{37} & f_{38} & f_{39} \\ f_{41} & f_{42} & f_{43} & f_{44} & f_{45} & f_{46} & f_{47} & f_{48} & f_{49} \\ f_{51} & f_{52} & f_{53} & f_{54} & f_{55} & f_{56} & f_{57} & f_{58} & f_{59} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G_F \\ \bar{C}_{H_2O} \\ \bar{C}_{C_2H_4} \\ \bar{C}_{C_2H_5OH} \\ T_5 \\ q \\ S \\ T_6 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

де G , G_{Π} та G_P – витрати газу водяної суміші, циркуляційного газу та реакційної суміші; $G_{C_2H_4}$, G_{H_2O} – витрати етилену та води на вході в систему; C_{H_2O} , $C_{C_2H_4}$ – концентрації води та етилену в газо-водяній суміші; C_{H_2O} , $C_{C_2H_4}$, $C_{C_2H_5OH}$ – концентрації водяного пару, етилену та етанолу на виході із реактора; $C_{C_2H_5OH}$ – концентрація спирту у

водяному розчині; Q – кількість теплоти, яка витрачається на нагрівання газу водяної суміші в трубчатій печі; q – кількість теплоти, яка поглинається охолоджуючою водою; L – витрата спирту; S – густина зрошення в абсорбері; $T_1 - T_8$ – температури потоків.

На основі матриць перетворення окремих елементів ХТС можуть бути отримані еквівалентні матриці перетворення $[C_1]$ та $[B_1]$. Система рівнянь (4.15.а) для нашого прикладу має вигляд:

$$[C_1] [X_1^{(1)}, \dots, X_1^{(k)}, \dots, X_1^{(n)}]^T + [B_1] U = 0 \quad (4.20)$$

[C₁]														
-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	α_{13}	α_{15}	C _{2H4} C _{H2O} T ₂
0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	α_{23}	α_{25}	
0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	α_{33}	α_{35}	
0	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	α_{43}	α_{45}	
b ₁₁	0	0	b ₁₃	-1	0	b ₁₂	0	0	0	b ₁₄	0	0	0	T ₃
b ₂₁	0	0	b ₂₃	0	-1	b ₂₂	0	0	0	b ₂₄	0	0	0	T ₅
d ₁₁	d ₁₂	d ₁₃	0	d ₁₄	0	-1	0	0	0	0	0	0	0	G _p
d ₂₁	d ₂₂	d ₂₃	0	d ₂₄	0	0	-1	0	0	0	0	0	0	C _{2H4}
d ₃₁	d ₃₂	d ₃₃	0	d ₃₄	0	0	0	-1	0	U	0	0	0	C _{H2O}
d ₄₁	d ₄₂	d ₄₃	0	d ₄₄	0	0	0	0	-1	0	0	0	0	C _{2H5OH}
d ₅₁	d ₅₂	d ₅₃	0	d ₅₄	0	0	0	0	0	-1	0	0	0	T ₄
0	0	0	0	0	f ₁₅	f ₁₁	f ₁₃	f ₁₂	f ₁₄	0	-1	0	0	G _{II}
0	0	0	0	0	f ₂₅	f ₂₁	f ₂₃	f ₂₂	f ₂₄	0	0	-1	0	T ₈

B₁									
α_{11}	α_{12}	α_{14}	0	0	0	0	α_{16}		
α_{21}	α_{22}	α_{24}	0	0	0	0	α_{26}		
α_{31}	α_{32}	α_{34}	0	0	0	0	α_{36}		
α_{41}	α_{42}	α_{44}	0	0	0	0	α_{46}		
0	0	0	0	0	0	0	b_{15}		
0	0	0	0	0	0	0	b_{25}		
0	0	0	d_{15}	0	0	0	d_{16}		
0	0	0	d_{25}	0	0	0	d_{26}		
0	0	0	d_{35}	0	0	0	d_{36}		
0	0	0	d_{45}	0	0	0	d_{46}		
0	0	0	d_{55}	0	0	0	d_{56}		
0	0	0	0	f_{16}	f_{17}	f_{18}	f_{19}		
0	0	0	0	f_{26}	f_{27}	f_{28}	f_{29}		

U									
$G_{C_2H_4}$									
G_{H_2O}									
T_1									
Q									
q									
S									
T_6									
1									

Наприклад, перші строчки матриць $[C_1]$ та $[B_1]$ заповнюються таким чином: з (4.16) випливає, що:

$$G = a_{11}G_{C_2H_4} + a_{12}G_{H_2O} + a_{13}G_{C_2H_5OH} + a_{14}T_1 + a_{15}T_8 + a_{16} \quad (4.21)$$

Якщо в (4.21) включити всі вхідні ($G_{C_2H_4}$, G_{H_2O} , T_1 , Q , q , S , T_6) та проміжні змінні (G , $C_{C_2H_4}$, C_{H_2O} , T_2 , T_3 , T_5 , G_P , $C_{C_2H_5OH}$, T_4 , $G_{\bar{C}}$, T_8) з коефіцієнтами, які дорівнюють нулю, у тому випадку, коли змінна, яка розглядається, не входить в (4.21), та з своїм коефіцієнтом в протилежному випадку, тому маємо:

$$\begin{aligned} & -G + 0 \cdot C_{C_2H_4} + 0 \cdot C_{H_2O} + 0 \cdot T_3 + 0 \cdot T_5 + 0 \cdot G_P + 0 \cdot \bar{C}_{C_2H_4} + \\ & + 0 \cdot \bar{C}_{H_2O} + 0 \cdot \bar{C}_{C_2H_5OH} + 0 \cdot T_4 + a_{13} \cdot G_{\bar{C}} + a_{15} \cdot T_8 + a_{11} \cdot G_{C_2H_4} + \\ & + a_{12} \cdot G_{H_2O} + a_{14} \cdot T_1 + 0 \cdot Q + 0 \cdot q + 0 \cdot S + 0 \cdot T_6 + a_{16} = 0 \end{aligned} \quad (4.226)$$

або

$$\begin{aligned} & [-1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ a_{13} \ a_{15}] \times \\ & \times [G \ C_{C_2H_4} \ C_{H_2O} \ T_2 \ T_3 \ T_5 \ G_P \ \bar{C}_{C_2H_4} \ \bar{C}_{H_2O} \ \bar{C}_{C_2H_5OH} \ T_4 \ G_{\bar{C}} \ T_8]^T + \\ & + [a_{11} \ a_{12} \ a_{14} \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ a_{16}] \times [G_{C_2H_4} \ G_{H_2O} \ T_1 \ Q \ q \ S \ T_6 \ 1]^T = 0 \end{aligned}$$

Таким чином, ми маємо перші строчки еквівалентних матриць перетворення $[C_1]$ та $[B_1]$. Аналогічно заповнюють матриці $[C_2]$ та $[B_2]$. Якщо кількість вихідних змінних ХТС невелика, причому вони являються вихідними змінними одного і того ж блоку, то

матриці $[C_2]$ та $[B_2]$ можна не будувати. В цьому випадку вектор Y розраховують по математичній моделі вихідного елемента ХТС.

Наприклад:

$$\begin{bmatrix} L \\ T_7 \\ C_{C_2H_5OH} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{31} & f_{32} & f_{33} & f_{34} & f_{35} & f_{36} & f_{37} & f_{38} & f_{39} \\ f_{41} & f_{42} & f_{43} & f_{44} & f_{45} & f_{46} & f_{47} & f_{48} & f_{49} \\ f_{51} & f_{52} & f_{53} & f_{54} & f_{55} & f_{56} & f_{57} & f_{58} & f_{59} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} G_P \\ \overline{C}_{C_2H_4} \\ \overline{C}_{H_2O} \\ \overline{C}_{C_2H_5OH} \\ T_5 \\ q \\ S \\ T_6 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

Розглянутий спосіб побудови еквівалентних матриць перетворення зручний, коли матриці $[C_1]$ та $[B_1]$, $[C_2]$ та $[B_2]$ складаються ручним способом. При розробці автоматизованих програм моделювання складних технологічних схем більш доцільно користуватися наступним методом.

4.5. Структурний аналіз замкнених ХТС, алгоритм та призначення

Перед розрахунком ХТС декомпозиційними методами необхідно розв'язати такі задачі:

1. визначити наявність в ХТС груп апаратів, які розраховуються разом (комплексів), та виділити ці комплекси;
 2. визначити попередню послідовність розрахунку комплексів та апаратів, які не входять в комплекси;
 3. для кожного комплексу визначити оптимальну множину розірваних потоків та послідовність розрахунку комплексу;
 4. визначити кінцеву послідовність розрахунку всієї ХТС.
- Цей перелік операцій об'єднують в задачу аналізу структури ХТС.

4.5.1. Алгоритм виділення комплексів

Існує велика кількість алгоритмів виділення комплексів на графі. Розглянемо методи виділення комплексів на основі аналізу матриці суміжності. Для цього розглянемо граф всього із чотирма вершинами, який зображений на рис.4.7 а.

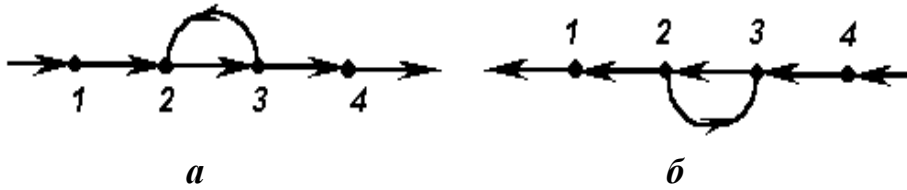
Виділення комплексів базується на такі властивості матриці суміжності: якщо її послідовно зводити до ступеню **2, 3, ..., n**, то елемент $a_{ij} \neq 0$ n -го ступеню матриці суміжності показує зв'язок i -ї та j -ї вершин через n дуг. Тому, у випадку існування контуру, який охоплює n вершин, діагональні елементи матриці суміжності не дорівнюють нулю. Оскільки треба визначити, дорівнює нулю чи ні елемент a_{ij} , тому при визначенні ступенів матриці суміжності використаємо логічні операції:

«і» (\wedge), «або» (\vee), «ні» (\neg):

$$\begin{array}{lll}
 1 \wedge 1 = 1 & 1 \vee 1 = 1 & \\
 1 \wedge 0 = 0 & 1 \vee 0 = 1 & \neg 1 = 0 \\
 0 \wedge 1 = 0 & 0 \vee 1 = 1 & \neg 0 = 1 \\
 0 \wedge 0 = 0 & 0 \vee 0 = 0 &
 \end{array}$$

Побудуємо послідовний ряд матриць $[A]^1$, $[A]^2$, $[A]^3$, $[A]^4$ для графа, який зображений на рис.4.7 а:

$$\begin{array}{cccc}
 [A]^1 & [A]^2 & [A]^3 & [A]^4 \\
 \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
 \end{array}$$



a – вихідний граф; *б* – переорієнтований граф
 Рис. 4.7 До алгоритму виділення комплексів

Якщо тепер логічно скласти всі матриці $[A]^s$ від $S = 1$ до $S = n$, то ми отримаємо матрицю шляхів $[C_N]$.

Елемент матриці шляхів $C_{ij} \neq 0$ вказує на наявність зв'язку між i - та j -ю вершинами графа через число дуг, яке не перевищує n :

$$\begin{aligned}
 [C_1] &= [A]^1 & [C_2] &= [A]^1 + [A]^2 \\
 \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
 [C_3] &= [A]^1 + [A]^2 + [A]^3 & [C_4] &= [A]^1 + [A]^2 + [A]^3 + [A]^4 \\
 \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} & & \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Замінімо напрямок всіх дуг на зворотні. При цьому комплекс не міняє свій склад, тому що прямі зв'язки стають зворотними, а зворотні – прямими. Для визначення всіх можливих шляхів між двома вершинами в переорієнтованому графі (рис.4.7 б) досить транспонувати матрицю $[C_N]$.

Якщо $C_{ij} = C_{ji} = 1$, то вершини i та j входять в один комплекс. Побудуємо нову матрицю $[D]$:

$$\begin{aligned}
 d_{ij} &= c_{ij} \wedge c_{ji} \\
 [D] &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}
 \end{aligned}$$

Для графа, який зображений на рис.4.7, отримуємо очевидний висновок: граф містить один комплекс, який включає вершини 2 та 3.

4.5.2. Визначення послідовності розрахунку розімкнених хіміко-технологічних систем

Кожний елемент, який входить в схему, може бути розрахований тільки тоді, коли відомі параметри всіх його вхідних потоків, тобто розраховані всі елементи, звідки подаються потоки в даний елемент. Тому обчислювальна послідовність розімкненої схеми (ОПРС) повинна мати таку властивість: якщо в ОПРС на i -му місці стоїть номер якогось апарату n_i , то номери всіх апаратів, потоки із яких поступають в апарат n_i , повинні в цій послідовності стояти раніше n_i .

Визначення оптимальної множини розірваних дуг

Ця задача вирішується в два етапи. На першому визначають всі контури, які входять в комплекс, а на другому – знаходять дуги, розрив яких дозволяє розірвати всі контури. При цьому сумарна параметричність розірваних дуг повинна бути мінімальною.

Один із способів виділення всіх контурів полягає у побудові прадерева комплексу. Прадеревом комплексу з коренем K є таке зображення всіх шляхів, які існують в комплексі, коли в кожену вершину, відмінну від K , входить тільки одна дуга. В вершину K прадерева жодна дуга не входить. Побудову кожного шляху продовжують до тих пір, поки на ньому не зустрінуться вершини, які повторюються. В цьому випадку побудова відповідного шляху закінчується, останню вершину називають висячою вершиною прадерева. Кожна висяча вершина належить контуру.

Приклад побудови прадерева комплексу наведений на рис.4.8.

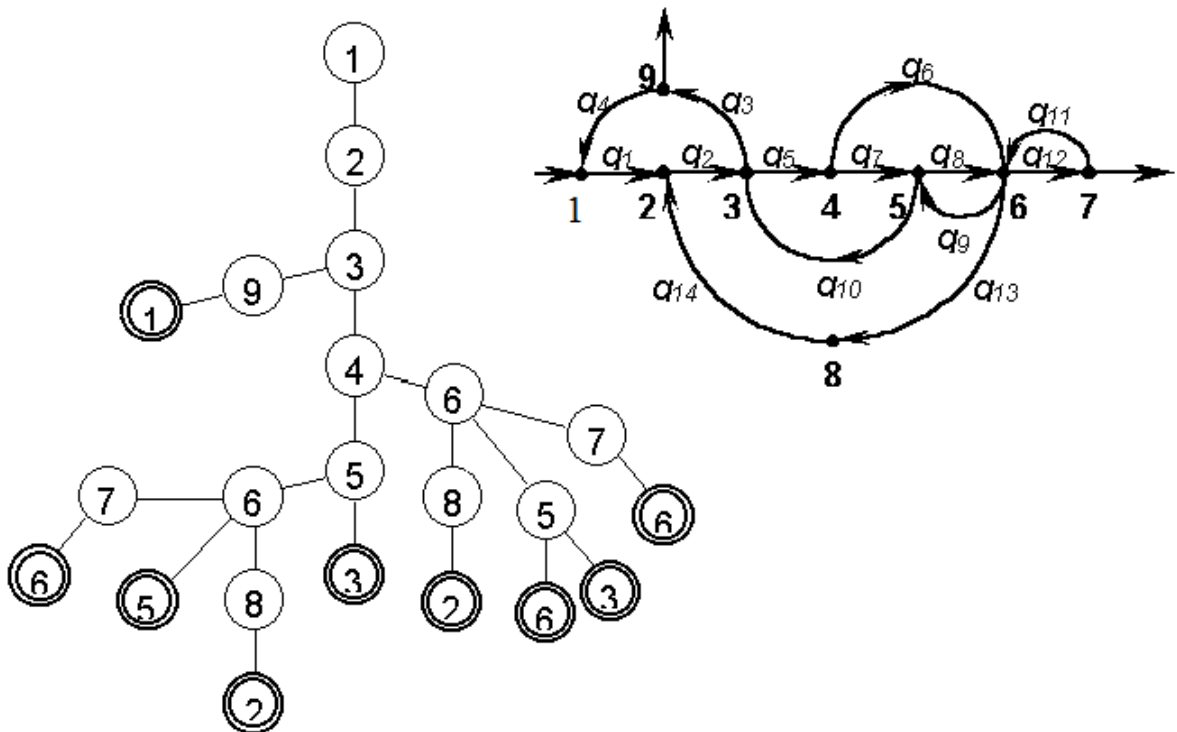


Рис. 4. 8. Приклад побудови прадерева комплексу

За допомогою прадерева комплексу можна виділити такі контури:

1. 1 – 2 – 3 – 9 – 1
2. 5 – 6 – 5
3. 6 – 7 – 6
4. 2 – 3 – 4 – 5 – 6 – 8 – 2
5. 3 – 4 – 5 – 3
6. 6 – 7 – 6
7. 2 – 3 – 4 – 6 – 8 – 2
8. 3 – 4 – 6 – 5 – 3
9. 6 – 5 – 6

Різні висячі вершини прадерева можуть належати одному і тому ж контуру, тому загальне число висячих вершин прадерева більше числа контурів. Всі однакові контури, крім одного, викреслюють із списку.

Тому список контурів буде мати такий вигляд:

Список контурів, записаний по вершинах	Список контурів, записаний по дугах
1. 1-2-3-9-1	1. 1-2-3-4
2. 5-6-5	2. 8-9
3. 6-7-6	3. 11-12
4. 2-3-4-5-3-6-8-2	4. 2-5-7-8-13-14
5. 3-4-5-3	5. 5-7-10
6. 2-3-4-6-8-2	6. 2-5-6-13-14
7. 3-4-6-5-3	7. 5-6-9-10

Розглянемо тепер пошук оптимальної множини дужок, що мають бути розірваними (ОМРД). Для вирішення цієї задачі будуватиметься матриця контурів, елементи K_{ij} (j – номер дуги, i – номер контура) якої визначаються за правилом:

$K_{ij} = 1$, якщо дуга входить в контур i ; $K_{ij} = 0$ – в протилежному випадку.

		Номери дуг													
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
Номери контурів	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	2	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0
	4	0	1	0	0	1	0	1	1	1	0	0	0	1	1
	5	0	0	0	0	1	0	1	0	0	1	0	0	0	0
	6	0	1	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	1	1
	7	0	0	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	0	0
f	=	1	3	1	1	4	2	2	2	2	2	1	1	2	2
π	=	6	4	7	8	5	5	5	6	5	5	6	7	7	5

Визначимо тепер контурну степінь дуги f : вона дорівнює числу контурів, в які входить дана дуга. Чим більше контурна степінь дуги, тим більше розімкнено контурів при її розриві. Якщо $f_i = f_j$, причому i - та j -а дуги входять в одні і ті ж контури, то краще розірвати дугу з меншою параметричністю π . Параметричність дуги характеризує число зв'язаних з нею параметрів. У нашому прикладі параметричності вибрані умовно. Максимальне значення f має 5-та дуга. Розрив цієї дуги приведе до зменшення числа контурів в комплексі (контури 4, 5, 6, 7 стануть розімкненими). Із матриці контурів викреслюємо ці контури та знову перераховуємо контурні степені дуг, які залишилися:

	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0
4	0	1	0	0	1	0	1	1	0	0	0	0	1	1
5	0	0	0	0	1	0	1	0	0	1	0	0	0	0
6	0	1	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	1	1
7	0	0	0	0	1	1	0	0	1	1	0	0	0	0
f	1	1	1	1	-	0	0	1	1	0	1	1	0	0
π	6	4	7	8	5	5	5	6	5	5	6	7	7	5

Тепер максимальне значення $f = 1$, але найменшу параметричність має друга дуга, тому її треба віднести до оптимально-розірваної множини дуг та виключити перший контур. Цей процес продовжують до тих пір, поки не залишиться не викреслених із матриці контурів:

$$f_i = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, 14).$$

У нашому випадку всі контури можуть бути розімкнені після розриву дужок 2, 5, 9 і 11. Після знаходження оптимальної множини розімкнених дуг визначають послідовність розрахунку кожного комплексу.

Отриману послідовність підставляємо в попередню послідовність розрахунку схеми.

Наприклад, граф, зображений на рис.4.1, має 2 комплекси $K1=(2, 3, 4)$ та $K2=(6, 7)$, і тому для нього попередня послідовність розрахунку схеми (ППРС) виглядає наступним чином:

$$\text{ППРС} = (1, K1, 5, K2)$$

Остаточна послідовність розрахунку схеми (ОПРС) при умові розриву потоків 5 і 11 буде:

$$\text{ОПРС} = [1, 4, 2, 3, 5, 7, 6]$$

Тепер можна застосувати декомпозиційний підхід для розрахунку схеми в отриманій послідовності. Тобто застосувати ітераційний метод, де будуть розірвано потоки 5 і 11.

4.6. Стратегія розробки складних технологічних систем на прикладі хімічного виробництва

Розглянемо процес розробки (проектування) на прикладі схеми отримання мономер вініл хлориду із заданою продуктивністю. Весь процес може бути розділений на етапи або кроки (див. рис. 4.9). Оскільки послідовність кроків розробки має узагальнений характер, то розглянемо її як стратегію.

Оцінка поставленої задачі та вихідних даних.

Наприклад розробити схему отримання мономер вініл хлориду із заданою продуктивністю.

- Дизайнерська група генерує кілька альтернатив ХТС. Це сама творча задача в процесі розробки, може вимагати "мозкового штурму".
- У цей же час виконується перегляд літературних джерел, патентів і т.ін.
- Після оцінки вихідного завдання й перегляду літературних джерел для найбільш перспективних альтернатив ХТС дизайнерською групою починається етап створення процесу I.1.

Етап створення процесу I.1.

Створення попередньої бази даних, що включає термодинамічні властивості, дані по займистості, токсичності, вартості хімікатів і т.п.

- У деяких випадках потрібно проводити експерименти по одержанню відсутніх даних.
- Синтез ескізного процесу починають зі створення схеми, що складається з реакції, операцій поділу й зміни температури та тиску.
- Вибір устаткування на стадії інтеграції.
- Відбраковування варіантів, що не дають задовільні результати.

Розробка базового варіанту I.2.

- Для кожного прийняттого варіанта розробляється одна схема процесу з відповідним матеріальним й енергетичним балансом, список основного устаткування.
- Таблиця матеріального балансу показує стан кожного потоку: температури, тиску, фаз, швидкості потоків, склад й ін. властивості.
- Цю роботу виконують з допомогою Computer-aided Process Simulator.
- Проектна група переглядає шляхи поліпшення елементів процесу й досягнення більше ефективної інтеграції процесу із застосуванням методів тепло- й енерго-інтеграції (наприклад обмін між холодними й гарячими потоками).
- Тут є ще 3 супутні задачі:
 - 1) Удосконалення первісної бази даних, доповнення даними з кінетики поділу, теплообміну, евристикам, вартості і т.д.
 - 2) Тестування на пілотній установці відповідної роботи устаткування та удосконалювання бази даних.
 - 3) Підготовка моделі для моделювання статички базового варіанта

Детальний синтез процесу з використанням алгоритмічних методів II.

- Методи визначення послідовностей поділу багатокomпонентних сумішей при умові зниження енергоспоживання.
- Створення й оцінка ефективних тепломереж з турбінами для відновлення енергії.
- Оцінка втрат енергії для кожного модуля схеми на основі 2-го закону термодинаміки. Особливий акцент на мінімізації витрат зігріваючої й охолоджуючої води.
- Забезпечення високого ступеня інтеграції по теплу й енергії.

Оцінка керованості інтегрованого виробництва III.

- Починається з якісного синтезу структури керування схемою. Закінчується моделюванням динаміки.
- Після кожного кроку відбувається постійна перевірка, що запропонований варіант ХТС є прийнятним.
- У протилежному випадку необхідно повернення назад і розробка нового базового варіанту

Детальне проектування IV.

- Визначення розмірів устаткування.
- Визначення капітальних витрат.
- Аналіз ефективності.
- Пошук оптимального варіанту схеми.

Паралельно до цих задач детального проектування виконується оцінювання старту проекту. Виконується моделювання динаміки ХТС. Можливо додавання деякого обладнання.

На цьому етапі, як і на наступному, що поєднує задачі фінального проектування, треба вирішувати проблеми, пов'язані із безпекою. При наявності пілотних установок бажано проведення натурних експериментів.

Ну и на завершення виконується:

- Написання звіту по розробленому проекту.
- Представлення на розгляд.
- Проектування кінцевого варіанту проекту.
- Креслення обладнання.
- Розрахунок трубопроводів.

Коли розроблення проекту повністю завершено, зводяться відповідні споруди та технологічні лінії із відповідними системами керування. Наступне – це запуск у дію, або як зараз прийнято казати «стартар». Описаний процес стає ланкою в усьому життєвому циклі такого продукту як винілхлорид.

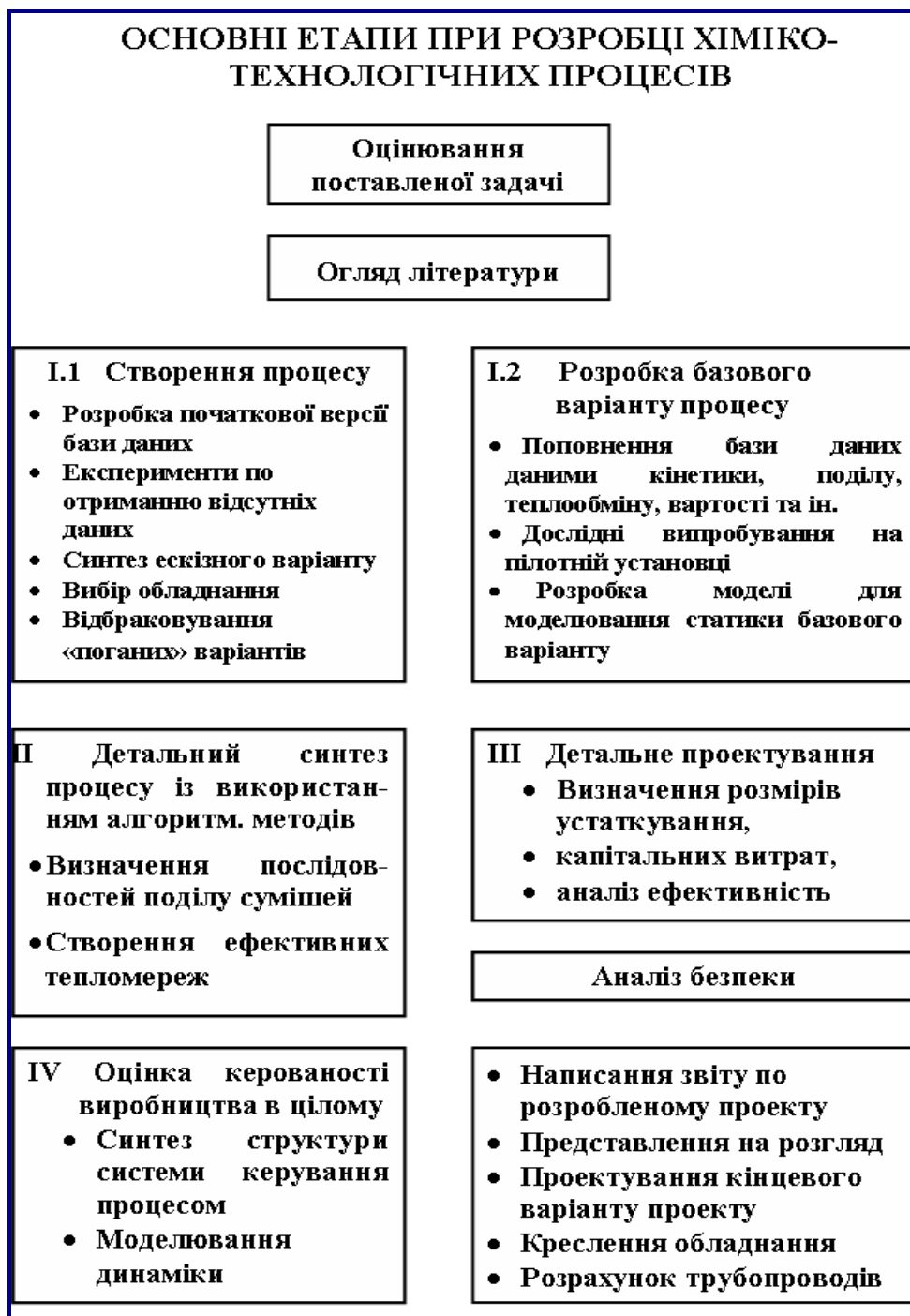


Рис. 4.9. Етапи розробки хімічного виробництва

Застосування деяких методів та підходів розділу 4 продемонстровано на прикладах в Додатку В.

4.7. Запитання та завдання для самоперевірки

1. Сформулювати основну задачу розрахунку матеріальних та теплових балансів (МТБ) ХТС.
2. Розкрити суть інтегральних методів розрахунку ХТС.
3. У чому полягає декомпозиційний підхід до розрахунку ХТС?
4. Порівняння інтегральних та декомпозиційних підходів до розрахунку ХТС.
5. Які можливі варіанти формулювання задачі розрахунку параметрів стану технологічних потоків ХТС?
6. В чому полягає розрахунок параметрів стану розімкненої схеми?
7. Чим визначається параметричність потоків ХТС?
8. Описати спосіб побудови еквівалентних матриць перетворення на прикладі реальної ХТС.
9. Які головні складові складають задачу аналізу структури ХТС?
10. Дати визначення шляху та контуру в графі?
11. Що називається комплексом у графі?
12. Дати визначення матриці суміжності.
13. Що таке список суміжності та його відмінність від матриці суміжності.
14. Алгоритм визначення комплексів у графі.
15. Як визначається обчислювальна послідовність розімкненої схеми?
16. В чому полягає спосіб виділення всіх контурів із використанням прадерева комплексу?
17. Як виконується пошук оптимальної множини розриваючих дуг?
18. Що таке контурна степінь дуги?
19. Як визначається обчислювальна послідовність розімкненої схеми?

Частина II. Методи та засоби рішення задач системного аналізу

Розділ 5. Програмне забезпечення для моделювання та дослідження ХТС.

Основні принципи побудови моделюючих програм в хімічній інженерії.

Перший етап комп'ютерного моделювання ХТС почався з переведення розрахунку матеріальних і теплових балансів ХТС із ручного на комп'ютерне, ознаменувався появою першої моделюючої системи в 1958 р. Flexible Flowsheet.

Протягом 60-70-х рр. було створено кілька десятків універсальних моделюючих програм (УМП): Flexible Flowsheet, Cheops, Chevron, SreedUp, Macsim, Network67, Chess, Pacer 245, Flowtran, Flowpack, Process та ін.

У Радянському Союзі було розроблено кілька моделюючих програм: РСС і РОСС, АСТР і БАСТР (ДІАП), НЕФТЕХИМ (ВНИПИНЕФТЬ) та ін.

Була вироблена загальна концепція універсальної моделюючої програми (УМП) для моделювання ХТС, що складається з 4 складових:

- 1) організуючої програми,
- 2) бібліотеки модулів для розрахунку хіміко-технологічних апаратів,
- 3) банка фізико-хімічних властивостей,
- 4) бібліотеки математичних модулів.

Дійсний розквіт комп'ютерного моделювання почався з появою персональних комп'ютерів. До цього часу в результаті тривалого процесу із загального числа виділилися чотири УМП, які зайняли лідируюче положення у світі:

- Aspen Plus,
- Hysys,
- ChemCad,
- Pro/II.

Ці УМП мають великі бібліотеки технологічних модулів, банки фізико-хімічних властивостей і обладнані зручним для користувача інтерфейсом. Їх широко використовують при проектуванні нових ХТС і при реконструкції діючих.

Зараз більшість організацій та підприємств в Україні, Росії та країнах СНД, а також навчальні інститути використовують для розрахунків у якості УМП одну із програм Aspen Plus, Hysys, ChemCad або Pro/II.

У цілому у світовій практиці за 60 – 80 роки був накопичений величезний досвід використання УМП для розрахунку стаціонарних (а також, у меншій степені, і динамічних) режимів ХТС, що розвіяв всі сумніви в ефективності такого використання.

Основними компонентами ПП для моделювання хіміко-технологічних процесів є:

- стаціонарні моделі основних операцій,
- термодинамічні моделі,
- банки даних,
- інтерфейс для зв'язку з іншими програмами,
- банки даних властивостей речовин (наприклад, банк даних DECHEMA),
- засоби обробки тексту,
- електронні таблиці,
- фрагменти САД.

Програмні продукти мають свої загальні й відмінні риси. Але основний спектр їхніх можливостей в значній степені збігається. В усіх УМП в процесі моделювання виконуються наступні основні кроки:

- побудова ХТС – визначення апаратів та з'єднуючих потоків;
- визначення речовин;
- специфікація термодинамічних моделей розрахунку та дані речовин;
- визначення вхідних потоків;
- специфікації для основних операцій і цільових продуктів;
- безпосереднє моделювання процесу;
- контроль і перевірка результатів.

Розробка загальних стандартів для програмного забезпечення моделювання хіміко-технологічних систем

Як видно з попередніх розділів, ринок програмного забезпечення для моделювання ХТС насичений достатньо потужними і достатньо дорогими програмними продуктами. Незважаючи на це, інколи виникає необхідність використовувати власні програмні компоненти в рамках пакету, який придбали. Крім того може виникнути ситуація, коли необхідно поєднати можливості різних програмних продуктів для рішення однієї задачі. Проблема стандартизації програмного забезпечення завжди була актуальною в усіх предметних областях. Робляться спроби вирішити цю проблему в світовому масштабі і в області моделювання процесів і схем хімічної технології.

Global CAPE OPEN – це тільки-но закінчений європейський проект, метою якого було вироблення загальних стандартів для моделювання хіміко-технологічних процесів і схем. Цей проект продовжував розробки, які почалися в рамках проекту CAPE OPEN (фінансувався Європейським Союзом в 1997–1999). Основною метою такої стандартизації є реалізація універсальних компонентів для побудови CAPE (Computer Aided Process Engineering) моделюючих систем і CAPE модулів, що використовують стандарт Plug and Play.

Найкрупніші постачальники на ринку програмного забезпечення цього типу Aspen Tech, AEA Technology (Hyprotech) і Simulation Science взяли на себе зобов'язання переробити свої продукти в стандарті CAPE OPEN.

Майже всі промислові компанії використовують деякий набір програмних засобів для рішення своїх повсякденних проблем зв'язаних з виробництвом. Серед них CAPE-засоби знаходять все більше застосування в промисловості, зв'язаної з хімією і нафтохімією, фармацевтикою, біохімією і агрохімією. Багато компаній відзначають збільшення продуктивності при використанні таких інструментальних засобів. Особлива перевага в умовах конкуренції з'являється при виборі найбільш підходящих засобів для кожної конкретної задачі. Такі засоби дають можливість легко зібрати весь необхідний комплект програмних модулів для обчислень. Стандарти припускають зв'язок між різноманітними частинами програмного забезпечення в імітаторі процесу.

Консорціум проекту складав велику групу користувачів, дослідників і постачальників програмного забезпечення з трьох континентів. Вони ставили стратегічною метою проекту прийняття такої відкритої системи зв'язків при моделюванні ХТС, яка дозволить користувачам застосовувати один симулятор всередині будь-якого іншого, а також програмних модулів одного постачальника CAPE засобів в програмному засобі іншого.

Це робить процес моделювання ХТС більш швидким і дешевим, що призведе до збільшення конкурентноздатності хіміко-технологічних об'єктів, які створюються і збереженню довкілля. Також буде створений великий новий ринок для постачальників компонентів моделювання, зросте конкуренція і скоротиться стадія розробки. Основні вдосконалення стосуються підвищення якості і узгодженості імітаційної технології в розробці моделі самого процесу, аналізу безпеки, розробці дій процедур і підготовці персоналу. Два основних постачальника імітаційних інструментальних засобів Aspen Tech and AEA Technology Huprotech прийняли зобов'язання стосовно випуску комерційних версій імітаторів процесу, що пропонують CAPE OPEN-сумісні інтерфейси.

Global CAPE-OPEN провів обстеження можливостей таких своїх партнерів як Mitsubishi Chemical, RWTH Aachen, і т.п. Крім того увага була звернута на учасників ринку CAPE, які їхні загальні потреби і як вони взаємодіють між собою.

Проект Global CAPE-OPEN розробив додаткові системи відкритих стандартів для CAPE-компонентів, пристосовував існуюче програмне забезпечення до стандарту CAPE-OPEN, займався підготовкою інструментальних засобів підтримки користувачів і постачальників CAPE OPEN-сумісних компонентів.

Розглянемо роботу універсальної моделюючої програми на прикладі найвідоміших програм-симуляторів.

Сучасні моделюючі програми Aspen Plus, Hysys, Chemcad, PRO/II

5.1. Програма-симулятор Aspen Plus

Aspen Plus є самою потужною та найдорожчою програмою. Це означає, що Aspen Plus може моделювати хімічні, нафтові, біохімічні процеси, термодинамічні фазові рівноваги, циклічні процеси і роботу теплових електростанцій. Програма містить безліч моделей для операцій розподілу, теплообмінних процесів, хімічних реакторів, насосів, компресорів і т.п. Програмне забезпечення містить великі банки даних з термодинамічними даними, такими як, наприклад, бази даних для речовин, фазових рівноваг більш, ніж 4000 речовин.

Система дозволяє моделювати процеси, аналізувати отримані результати, і в такий спосіб розробляти промислові технології, що забезпечують оптимальну продуктивність і рентабельність.

Можливості моделювання процесів у Aspen Plus дозволяє прогнозувати поведінку технологічного процесу, використовуючи фундаментальні закономірності, такі як взаємодія маси й енергії, закони рівноваги фаз і кінетику реакцій. За допомогою надійних термодинамічних даних, відтворення реальних умов роботи й точних моделей устаткування в Aspen Plus можна моделювати фактичний стан будь-якої хіміко-технологічної установки.

В Aspen Plus використовується декомпозиційний (модульний) підхід до моделювання та моделювання з урахуванням структури рівнянь. Можлива умовна оптимізація (у тому числі й з економічним критерієм) усього процесу із застосуванням відповідних алгоритмів рішення. Для рішення використовуються ефективні, збіжні алгоритми рішення.

Для моделювання необхідно задати всі речовини, що беруть участь у процесі. Введення даних може відбуватися як після набору хімічної формули, так і після завдання імені компонента. Тут же вказується модель для термодинамічних

розрахунків. Важливою термодинамічною величиною, з якою розраховуються моделі є: коефіцієнти поділу (активність, фугитивність), ентальпія, ентропія, вільна енергія Гібса.

Ці величини фазної рівноваги розраховуються за допомогою наступних моделей: ідеальні, Wilson, NRTL, UNIQUAC. У ранніх фазах при відсутності точних даних рівноваги використовують також груповий метод UNIFAC.

Потрібно також специфікувати вхідні потоки. При складних технологічних схемах доцільно часто також визначати потік як наближення для ітерації.

Для кожного потоку вказуються параметри термодинамічного стану тиск і температура (або тиск і співвідношення фаз, або температуру й співвідношення фаз); склад і кількість.

Дані й моделі теплофізичних властивостей мають ключове значення для одержання достовірних результатів. Aspen Plus дозволяє використання даних і моделей фізичних властивостей, наявних у додатку Aspen Properties™.

Наявні характеристики Aspen Properties включають:

- покомпонентні бази даних і прикладні бази даних;
- система оцінки властивостей;
- бази даних;
- система аналізу даних випробування;
- система експертизи електролітів;
- доступ до бази даних теплофізичних властивостей DECHEMA DETHERM™ через Інтернет.

Використання *Plot Wizard* (майстра створення графіків) забезпечує можливість візуалізації результатів моделювання, наприклад, графіки складних кривих, гідравлічного навантаження для оптимального дизайну колони. Крім того, *Plot Wizard* підтримує графічне представлення системи аналізу даних, а також загальних графіків по координатах X , Y для будь-яких векторних даних.

Аналіз моделей в Aspen Plus включає в себе:

- аналіз збіжності – для автоматичного аналізу й розрахунку оптимального розриву потоків, методу конвергенції потоків і послідовність рішень для великих технологічних процесів з рециркуляцією потоків і інформації;
- аналіз чутливості – для створення таблиць і графіків, що відображають відмінність продуктивності технологічного процесу залежно від змін, що вносяться до відповідних специфікацій устаткування і умови роботи;
- запуск декількох варіантів симуляції з різними заданими значеннями з метою проведення подальшого порівняльного аналізу;
- розрахунок специфікацій – для автоматичного обчислення умов роботи або параметрів роботи устаткування з метою досягнення спеціальних задач відносно продуктивності;
- забезпечення відповідності моделі технологічного процесу й даних реальної установки для одержання точного перевіреного уявлення про роботу реальної установки;
- оптимізація – сприяє визначенню умов роботи установки, що забезпечують максимальне збільшення продуктивності кожної вказаної цільової функції, включаючи вихід процесу, енерговитрати, чистоту потоку й економіку процесу.

5.1.1. Інтерфейс Aspen Plus

Aspen Plus має інтерфейс Microsoft® Windows®. Даний інтерфейс містить технологічну схему процесу (*PFD*), призначену для графічного відображення технологічного процесу, вікно *Data Browser* (вікно даних), призначене для введення даних, кнопку *Next* (далі) для переміщення по вікну даних для введення вхідних даних і різних панелей інструментів, кнопкам і «гарячим» клавішам. Користувальницький інтерфейс містить майстер створення графіків за результатами моделювання й забезпечує підтримку характеристик OLE Microsoft®, таких функцій як «копіювати / вставити / зв'язати» і OLE-Автоматизації.

Aspen Plus містить дані, властивості, моделі роботи установок, настроювання за замовчуванням, звіти й інші характеристики. Найголовніші з них:

- *Flowsheet* (Технологічна схема) – головне вікно в Aspen Plus для моделювання процесів;
- *Set-up windows* (Вікна настройок) – сторінки вводу даних моделі;
- *Blocks* (Блоки) – значки, що використовуються в технологічній схемі, що моделює хіміко-інженерне обладнання;
- *PFD* (Технологічна схема процесу) – подібна до технологічна схеми (*Flowsheet*), але є можливість додавати до схеми текст, таблиці та позначення;
- *Next button* (Кнопка «Далі») – використовується для переходу між вікнами налаштувань.

Головне вікно Aspen Plus

Головне вікно Aspen Plus (рис. 5.1) включає:

- рядок заголовку вікна – горизонтальна смужка у верхній частині вікна з назвою діалогового вікна та оброблюваного файлу;
- рядок головного меню – горизонтальна смужка, що розташована під рядком заголовку та містить елементи вибору (пункти меню), доступні в активному додатку;
- панель інструментів – смужка, розташована під головним меню, що містить кнопки для найбільш часто використовуваних та швидко доступних елементів головного меню;
- кнопку «Далі» – кнопка виклику експертної системи Aspen Plus, яка збирає дані, необхідні для завершення розрахунків;
- рядок стану (статусу) – рядок внизу екрана, в якому відображається важлива для користувачів інформація;
- кнопку «режим вибору» – виключає можливість добавляти нові об'єкти, а дає змогу працювати вже існуючими в робочому вікні;
- вікно технологічної схеми (Робоче вікно) – вікно, в якому безпосередньо будується схема процесу;
- бібліотеку моделей – область в нижній частині головного вікна, що містить перелік доступних блоків та елементів моделей.

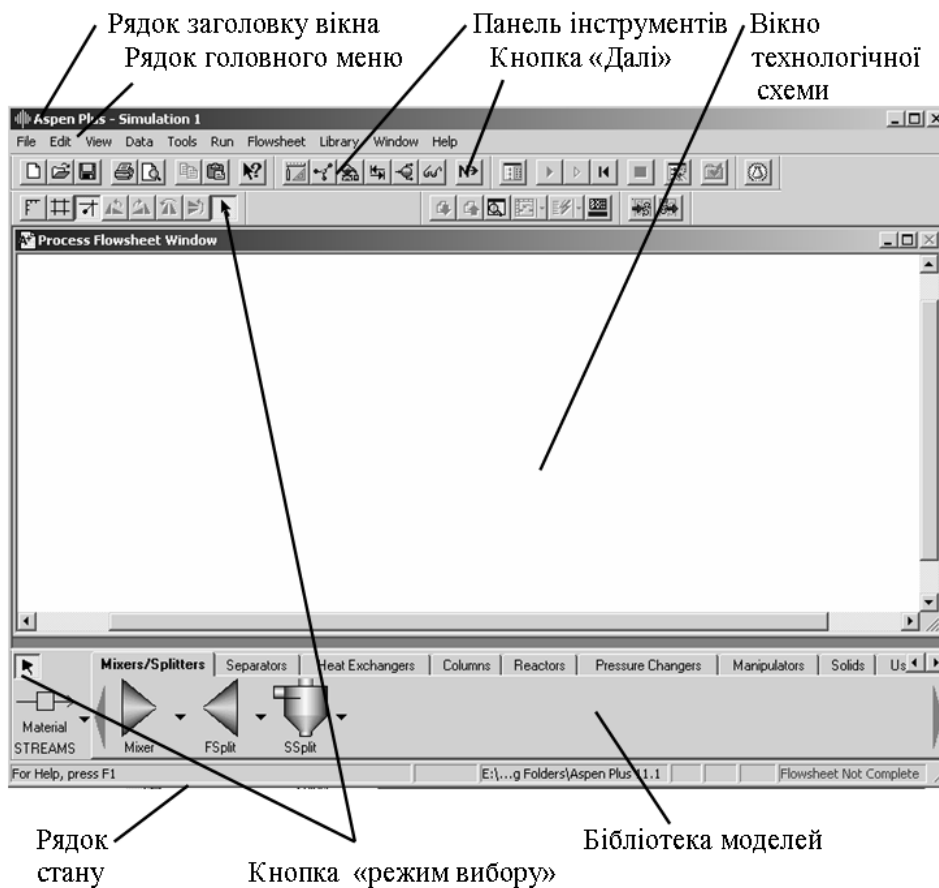


Рис. 5.1. Головне вікно програми Aspen Plus

Головне меню

Головне меню містить елементи вибору (пункти меню), доступні в активному додатку. Розглянемо лише ті пункти меню, що являються унікальними та вирізняють Aspen Plus від інших програм з аналогічним інтерфейсом Microsoft® Windows®.

Меню Data (Дані)

Дане меню містить пункти пов'язані головним чином з вікном даних та в більшості повторює всі його елементи. Представимо опис призначення пунктів даного меню (рис. 5.2):

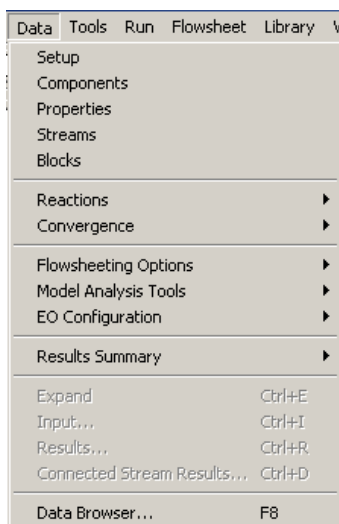


Рис. 5.2. Меню Data

- *Setup* – налаштування типу запуску, класу потоку, одиниць вимірювань, опцій звіту та ін.;
- *Components* – ввід компонентів з бази даних, псевдо компонентів, атрибутів компонентів та ін.;
- *Properties* – зазначення властивостей методів та моделей, молекулярної структури та ін.;
- *Streams* – вказівка вхідних даних потоків та відображення результатів;
- *Blocks* – зазначення вхідних даних та специфікації блоків та відображення результатів;
- *Reactions* – реакції:
 - *Chemistry* – визначення хімічних реакцій для задач електролітів;
 - *Reactions* – ввід реакцій;
- *Convergence* – конвергенція:
 - *Conv Options* – вказівка параметрів та методів для блоків конвергенції;
 - *EO Conv Options* – вказівка параметрів для рішень орієнтованих на рівняннях;
 - *Tear* – розрив потоку, який знаходиться в ре циклі.
 - *Convergence* – визначення блоків конвергенції;
 - *Conv Order* – вказівка порядку (черги) конвергенції блоків;
 - *Sequence* – визначення часткової чи повної послідовності розрахунку всієї схеми;
- *Flowsheeting Options* – опції схеми:
 - *Design Spec* – розробка специфікації на модель;
 - *Calculator* – командний рядок Фортрану;
 - *Transfer* – копіювання інформації блоку чи потоку з однієї частини схеми до іншої;
 - *Stream Library* – отримання інформації про потік з бібліотеки потоків;
 - *Balance* – вирішення відношень масових та енергетичних балансів;
 - *Measurement* – вимірює змінні;

- *Pres Relief* – розробка та оцінка систем зі змінним тиском;
 - *Add Input* – введення додаткової інформації, що буде додаватися до файлу з вхідними даними;
- *Model Analysis Tools* – інструменти аналізу на основі моделі:
 - *Sensitivity* – дослідження на чутливість результатів моделювання до змінних;
 - *Optimization* – максимізація чи мінімізація вказаної користувачем цільової функції;
 - *Constraint* – накладання обмежень на задачу оптимізації;
 - *Data Fit* – підгонка моделі до даних;
 - *Case Study* – визначення варіантів множини технологічних моделей для одиночного запуску;
- *EO Configuration* – конфігурація моделей орієнтованих на рівняннях:
 - *Solve Options* – налаштування головного методу рішення та опцій;
 - *EO Variables* – дослідження відкритих змінних та атрибутів;
 - *EO Input* – ініціалізація відкритої змінної;
 - *Aliases* – визначення альтернативного імені для відкритої змінної;
 - *Objective* – визначення та вказівка цільових функцій для режимів узгодження та оптимізації;
 - *Spec Groups* – вказівка груп специфікацій, що містять відкриті змінні;
 - *Connection* – зазначення зв'язків між змінними, портами та потоками;
 - *Ports* – вказівка портів, що містять відкриті змінні;
 - *EO Options* – опції EO;
 - *Local Scripts* – написання локальних скриптів по відношенню до ієрархії;
 - *Global Scripts* – написання глобальних скриптів по відношенню до установки;
 - *Script Methods* – визначення скриптів для різних методів;
 - *EO Sensivity* – зазначення змінних для проведення дослідів на чутливість;
- *Results Summary* – звіт результатів:
 - *Run Status* – відображає інформацію про стан запуску та наявність помилок;
 - *Streams* – звіт результатів для потоків;
 - *Convergency* – звітність з розробки специфікації на модель та статус потоків конвергенції;
- *Expand* – розкриття ієрархії блоку;
- *Input...* – відображення форми вводу даних для даного елемента;
- *Results...* – відображення форми з отриманими результатами для даного елемента моделі;
- *Connected Stream Results...* – відображення форми з представленими вхідним та вихідними результатами для обраного блоку;
- *Data Browser...* – відображення вікна перегляду даних.

Меню Tools (Інструменти)

Пункти меню *Tools* (рис. 5.3) призначені головним чином для графічного відображення результатів моделювання. Наведемо опис можливостей пунктів даного меню.

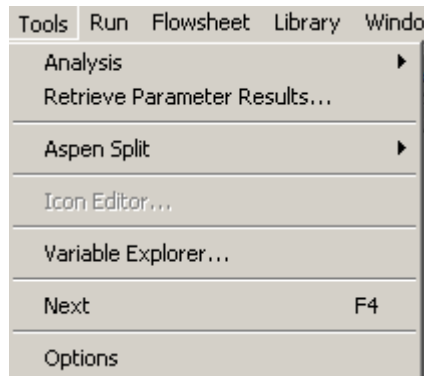


Рис. 5.3. Меню Tools

- *Analysis* – аналіз:
 - *Property* – властивості:
 - ✓ *Pure...* – побудова та відображення таблиць та графіків властивостей чистих компонентів;
 - ✓ *Binary...* – генерація бінарних діаграм $T/xу$, $P/xу$ та енергії Гібса змішуючи графіки та таблиці;
 - ✓ *Residue...* – генерація остаточних кривих;
 - *Stream...* – потік:
 - ✓ *Point...* – розрахунок термодинамічних та транспортних властивостей вибраного потоку;
 - ✓ *Component flow...* – відображення витрат компонентів обраного потоку;
 - ✓ *Composition...* – состав потоку;
 - ✓ *Petroleum...* – нафта;
 - ✓ *Dist-Curve* – дистиляційна крива;
 - ✓ *Bubble/Dew...* – графік температури кипіння та точки роси;
 - ✓ *PV Curve...* – графік в координатах тиск-витрати;
 - ✓ *TV Curve...* – графік в координатах температура-витрати;
 - ✓ *PT-Envelope...* – фазні криві в координатах тиск-температура;
 - *Hcurve...* – вставка кривих нагрівання та охолодження;
 - *Sensitivity...* – дослідження впливу на остаточний результат варіювання значень змінних;
 - *Data-Fit...* – підгонка моделі до даних;
 - *Pressure Checker* – виконує аналіз витрат куруючи тиском;
- *Retrieve Parameter Results...* – отримання повних результатів параметрів;
- *Aspen Split* – розділення:
 - *Azeotrope Search...* – пошук азеотропів;
 - *Ternary Maps...* – трійчасті карти;

- *Icon Editor...* – створення та зміна піктограм блоків моделей;
- *Variable Explorer...* – провідник змінних;
- *Next* – відображає наступну необхідну для заповнення форму;
- *Options* – опції та на лаштунки Aspen Plus.

Меню Run (Запуск)

Пункти меню *Run* (рис. 5.4) використовуються для запуску процесу моделювання. Опишемо можливості пунктів даного меню.

Run	Flowsheet	Library	Window
Settings			Ctrl+F7
Run			F5
Batch			
Step			Ctrl+F5
Reinitialize...			Shift+F5
Stop Points...			F9
Move To...			Ctrl+F9
Check Results			Ctrl+F8
Load Results			
Reconcile All			
Reconcile All Streams			
Connect to Engine...			Shift+F7

Рис. 5.4. Меню Run

- *Settings* – настройка параметрів запуску;
- *Run* – запуск процесу розрахунків;
- *Step* – перехід до наступного в послідовності блоку;
- *Reinitialize...* – очистка отриманих результатів та ініціалізація розрахунку;
- *Stop Points...* – назначає чи видаляє точки зупину в процесі моделювання;
- *Move To...* – обирає наступний блок для проведення розрахунків;
- *Check Results* – відображає форму з сумарними результатами;
- *Load Results* – оновити поточні результати;
- *Reconcile All* – копіювання отриманих результатів для потоків та блоків в їх форми з вхідними даними;
- *Reconcile All Streams* – копіювання отриманих результатів для потоків в форми з вхідними даними;
- *Connect to Engine...* – підключитися до комп'ютеру, на якому будуть проводитися розрахунки.

Меню Flowsheet (Технологічна схема)

Пункти меню *Flowsheet* (рис. 5.5) використовуються при створенні технологічної схеми процесу. Опишемо можливості пунктів даного меню.

Flowsheet	Library	Window	Help
Flowsheet Sections		F11	
Change Section		Ctrl+F11	
Change Stream Class		Ctrl+Q	
Reconnect Sources			
Reconnect Destinations			
Exchange Icons		Ctrl+K	
Align Blocks		Ctrl+B	
Reroute Streams		Ctrl+J	
Hide		▶	
Unplace Blocks		Ctrl+U	
Group			
Find Object...			

Рис. 5.5 Меню *Flowsheet*

- *Flowsheet Sections* – відображає діалогове вікно по роботі з секціями технологічної схеми;
- *Change Section* – переміщує обрані блоки до іншої секції технологічної схеми чи до нової секції;
- *Change Stream Class* – змінює клас потоку для обраного елемента;
- *Reconnect Sources* – перез'єднати джерело потоку (звідки виходить) з іншим портом чи блоком;
- *Reconnect Destinations* – перез'єднати адресат потоку (куди входить) до іншого порту чи блоку;
- *Exchange Icons* – замінити піктограму блоку моделі на наявний інший;
- *Align Blocks* – вирівнює два блоки з'єднані потоками на один рівень;
- *Reroute Streams* – автоматично вирівнює потоки на рівень блоків без з'єднання;
- *Hide* – сховати:
 - *ID* – ховає чи показує *ID* ідентифікаційне ім'я обраного елемента моделі – потоку чи блоку;
 - *Global Data* – приховує дані блоку чи потоку на глобальному рівні;
 - *Annotation* – ховає нотатки до обраного потоку чи блоку;
- *Unplace Blocks* – тимчасово убирає обраний блок з схеми без його видалення та можливістю повернення до схеми без втрати зв'язків потоками з іншими блоками;
- *Group* – дозволяє згрупувати обрані об'єкти;
- *Find Object...* – визначає місце знаходження вказаного в діалоговому вікні потоку чи блоку.

Меню *Library* (Бібліотека)

Пункти меню *Library* (рис. 5.6) використовуються при роботі з бібліотекою моделей. Опишемо можливості пунктів даного меню.

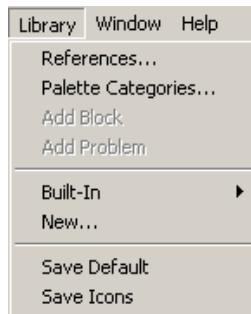


Рис. 5.6. Меню Library

- *Preferences...* – вибір доступних бібліотек моделей;
- *Palette Categories...* – вибір доступних категорій чи вкладок бібліотеки моделей;
- *Add block* – додати обраний блок до бібліотеки моделей користувача;
- *Add Problem* – додати задачу до бібліотеки моделей користувача;
- *Built-In* – вбудований:
 - *View* – редактор вбудованої бібліотеки моделей.
- *New...* – створення нової бібліотеки моделей користувача;
- *Save Default* – збереження поточного виду бібліотеки моделей, як стандартного, за умовчанням;
- *Save Icons* – збереження поточного вибору піктограм для активної бібліотеки моделей.

5.1.2. Панелі інструментів Aspen Plus

За умовчанням Aspen Plus має панелі інструментів (рис. 5.7):

- стандартна панель інструментів;
- перегляд даних (*Data Browser*);
- запуск моделі, початок розрахунків;
- технологічна схема;
- панель малювання.

Всі кнопки, що розміщені на панелях інструментів можна знайти в пунктах головного меню, тому розглядатися не будуть. При піднесенні до них курсору миші з'являється підказка про призначення даної кнопки. Розглянемо лише панель інструментів технологічної схеми та панель малювання, які не зустрічаються та не повторюються в головному меню.

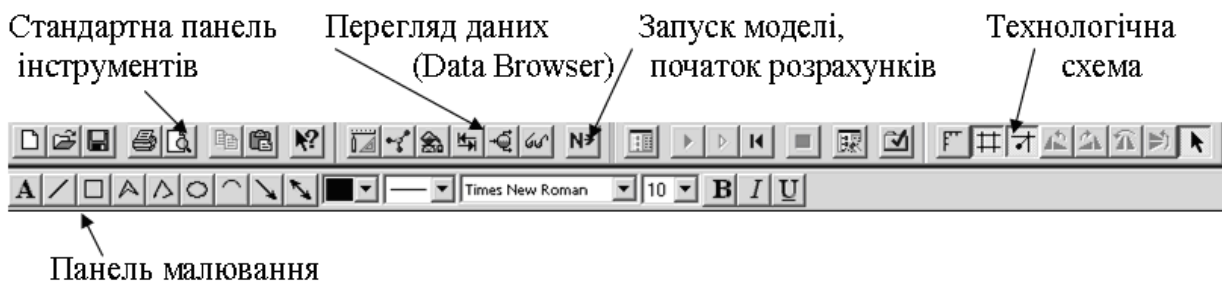


Рис. 5.7. Панелі інструментів Aspen Plus

Панель інструментів технологічної схеми

Дана панель стане корисною в наступних цілях:



– градування області технологічного вікна шкалою;



– відображення сітки у вікні технологічної схеми;



– прив'язка до сітки всіх елементів моделі;



– повернути відповідно вибраний блок вліво, вправо, на 180° вертикально, на 180° горизонтально;



– перехід до режиму вибору об'єктів.

Панель малювання

Панель малювання призначена для технічного оформлення технологічної схеми з усіма необхідними атрибутами або ж для створення графічних приміток. Викликається при натисканні правої кнопки миші в пустому місці вікна технологічної схеми та послідовному виборі з спливаючого меню пункту *Draw Toolbar*. При цьому всі нанесені графічні та текстові об'єкти не беруть участь у розрахунках та не впливають на процес моделювання. Елементи ж самої панелі стандартні та містять класичні за призначенням кнопки, що і для більшості навіть самих простих графічних програм.

5.1.3. Бібліотека моделей

Використовуючи бібліотеку моделей (рис. 5.8) можна вибирати будь-які з представлених блоків управління моделлю та розмістити значки потрібних елементів на технологічну схему.

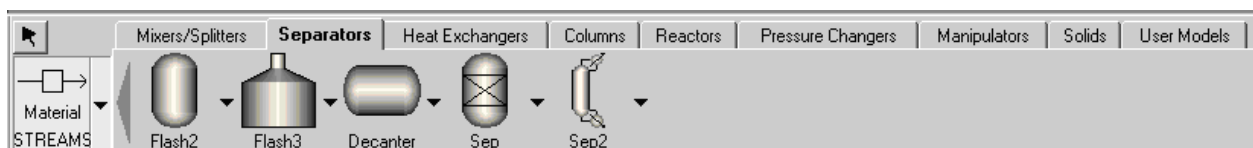


Рис. 5.8. Бібліотека моделей

Моделі технологічних апаратів, що містяться в бібліотеці моделей, згруповані по типу в наступні закладки:

- *Mixers/Splitters* – змішувачі;
- *Separators* – розділювачі;
- *Heat Exchangers* – теплообмінники;
- *Columns* – колони;
- *Reactors* – реактори;
- *Pressure Changers* – апарати для зміни тиску;
- *Manipulators* – маніпулятори;
- *Solids* – тверді речовини;
- *User Models* – моделі користувача.

Окрім блоків в бібліотеці моделей наявний вибір одного з трьох типів потоку на відповідній кнопці (рис. 5.9):

- матеріальний;
- тепловий;
- робочий.

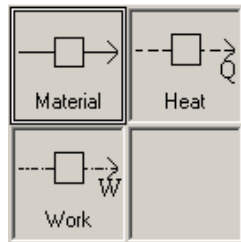



Рис. 5.9. Типи потоків

Вікно перегляду даних

Вікно перегляду даних (рис. 5.10) відображає відомості про модель у вигляді ієрархічного дерева з можливістю перегляду усіх наявних і доступних вхідних величин, вихідних та описаних об'єктів, що необхідні для розрахунку моделі.

Для того щоб відкрити вікно перегляду даних необхідно:

- натиснути кнопку «Перегляд даних»  на панелі інструментів «Перегляд даних»;
- з меню «Дані» (*Data*) вибрати пункт «Перегляд даних»;
- натиснувши клавішу *F8* на клавіатурі;
- подвійним клацанням на будь-якому елементі моделі в робочому вікні.
- Вікно «Перегляд даних» використовується для:
- відображення моделей, табличних відомостей та об'єктів керування;
- перегляду моделей зі складною структурою та табличних даних без повернення до меню «Дані», наприклад, коли необхідно перевірити властивості та параметри вхідних величин;
- перевірки статусу під час запуску розрахунку;
- перегляду наявних результатів обрахунків.

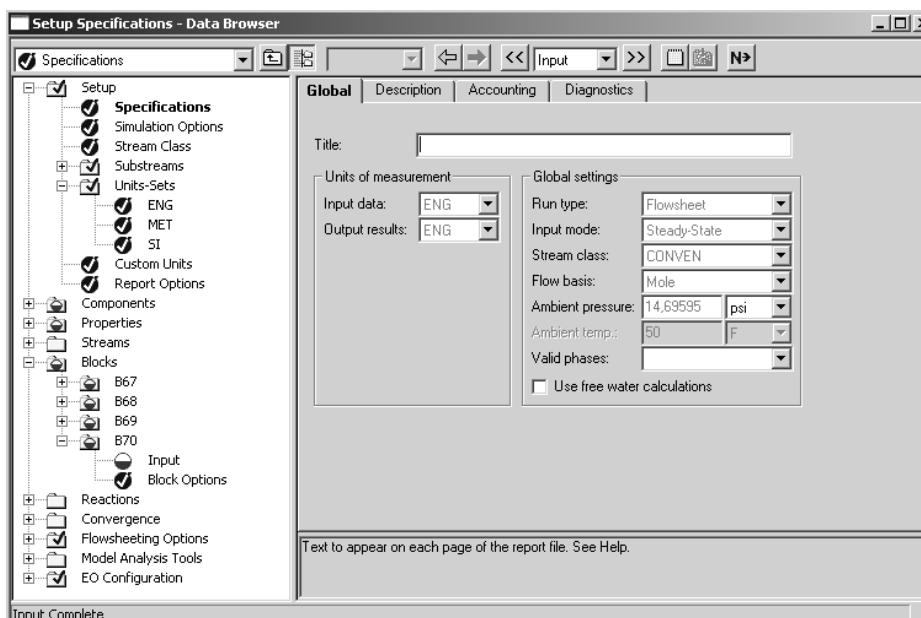


Рис. 5.10. Вікно перегляду даних

Призначення кожної з форм та папок вікна перегляду даних було описано вище, коли річ йшла про меню *Data* (рис. 5.2), адже пункти цього меню відповідають дереву папок цього вікна та розкривають одну з вибраних категорій для перегляду, вказівки чи зміни даних.

В наступному розділі розглянуто рішення засобами Aspen Plus прикладів з хімічної технології. Для більш чіткого розуміння послідовності кроків щодо розв'язання задач вони викладені в тій послідовності в якій їх і треба виконувати. Треба відзначити, що послідовність дій не завжди має значення, головне виконати всі дії і заповнити всі потрібні форми.

Робота в Aspen Plus передбачає два основні етапи:

- 1) створення моделі ХТС із використанням типових блоків;
- 2) заповнення всіх необхідних форм вхідними даними.

Надалі наводитимуться назви блоків, які будуть використані. При подвійному кліку на будь якому з них, або вибору відповідного пункту меню відкривається *Data Browser*. В ньому всі форми для введення даних розбиті по групах. В описі дій щодо вирішення конкретних задач використовуються інструкції у вигляді **Форма1** → **Форма2...** (інструкції набрано курсивом). Це передбачає, що користувач вибере їх в такій саме послідовності в *Data Browser*. Для того, щоб користувач задав параметрам певні значення, вони в поясненнях приведені у вигляді: **параметр = значення** (для їх відділення від решти тексту також використовується курсив).

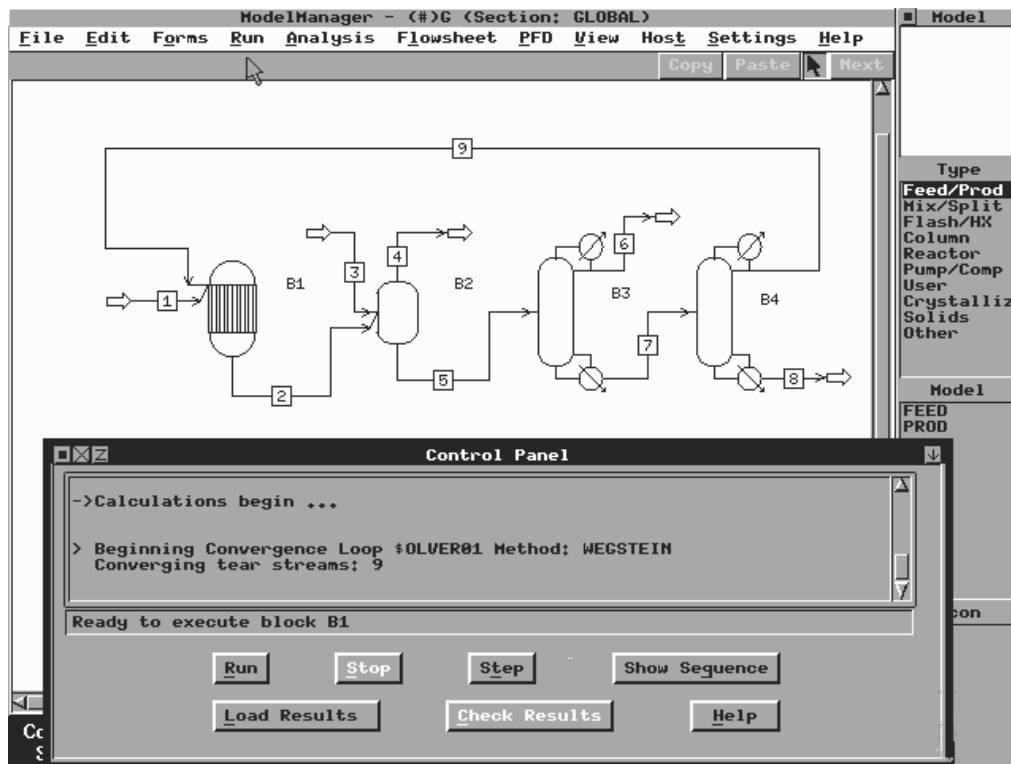


Рис. 5. 11. Вікно програми після виконання розрахунку схеми

Використовується декомпозиційно модульне моделювання і моделювання із урахуванням структури рівнянь.

Можлива умовна оптимізація (в тому числі і з економічним критерієм) усього процесу з застосуванням відповідних алгоритмів. Використовуються ефективні, кінцево-збіжні алгоритми рішення задач оптимізації.

При рішенні можуть задаватися основні умови для моделювання. Наприклад, щоб область значень температури і тиску були обмежені. При цьому потрібно обернути увагу на те, що вузькі обмеження покращують збіжність, однак занадто тісні обмеження призводять до помилок при імітації. Можливо задати максимальний час імітації в секундах і максимальній кількості помилок, після яких імітація повинна припинитися. Для моделювання доцільно використовувати єдину систему одиниць. У випадку, якщо система СІ не використовуються, то можна визначати власну систему одиниць і зберігати її при всіх командах вводу даних.

Для моделювання необхідно специфікувати всі речовини, що беруть участь в процесі. Кожна речовина заповнює власний рядок. Введення даних може відбуватися або після набору хімічної формули, або після завдання англійського імені компонента. Тут же вказується модель для термодинамічних розрахунків. Важливою термодинамічною величиною, з якою розраховуються моделі є: коефіцієнти розподілу (активність, фугітивність), ентальпія, ентропія, вільна енергія Гіббса.

Ці величини рівноваги фаз розраховуються за допомогою наступних моделей: ідеальні, Wilson, NRTL, UNIQUAC. В ранніх фазах за відсутності точних даних рівноваги використовують також груповий засіб UNIFAC.

Необхідно також специфікувати вхідні потоки. При складних технологічних схемах доцільно часто також визначати потік як наближення для ітерації.

Для кожного потоку специфікувати параметри: термодинамічний стан (2 параметри): тиск і температура, або тиск і відношення фаз, або температуру і відношення фаз; склад і кількість. Спеціальна опція дасть можливість задавати алфавітно-цифровим способом графічне введення технологічної схеми. Це дасть можливість виконувати всі вводи даних і графічні модифікації за допомогою миші.

Aspen Plus має типовий Windows інтерфейс, і кожному користувачу програм цієї операційної системи відомо, що часто одну і ту ж задачу можна розв'язати різними шляхами. Тому можливо, що досвідчений користувач знайде більш швидкий і гнучкий шлях вирішення задач ніж пропонується. Приклади рішення хіміко-технологічних задач в програмі Aspen Plus надано у Додатку Б.

5.2. Програма Hysys

Програмна система Hysys призначена для моделювання та оптимізації хіміко-технологічних процесів. У склад програми входять:

- база даних фізико-хімічних властивостей 10000 різних речовин;
- 27 альтернативних пакетів для розрахунку фізичних властивостей сумішей;
- пакет для опису нафтових фракцій та розрахунку їх властивостей;
- методи термодинамічних розрахунків фазової рівноваги у трьохфазних системах «пара-легка рідина-тяжка (або водна) рідина»;
- комп'ютерні моделі ректифікаційних та абсорбційних колон, паро рідинних сепараторів, хімічних реакторів, теплообмінників, кип'ятильників та холодильників, компресорів, насосів та ін.;
- засоби візуалізації схем, графічні та текстові редактори;
- математичні методи та програмні засоби розрахунку та оптимізації хіміко-технологічних систем, в тому числі із зворотними зв'язками;
- засоби формування звітів про результати моделювання;
- засоби створення нових комп'ютерних моделей апаратів хімічної технології;
- засоби розширення існуючих баз даних про фізико-хімічні властивості компонентів;
- засоби налаштування інтерфейсу системи.

Всі ці засоби дозволяють ефективно вирішувати широке коло задач, що виникають при дослідженні та оптимізації хіміко-технологічних процесів, а отримані результати, як правило, використовуються проектними та виробничими організаціями.

Головне русіфіковане вікно програми наведено на рис. 5.12.

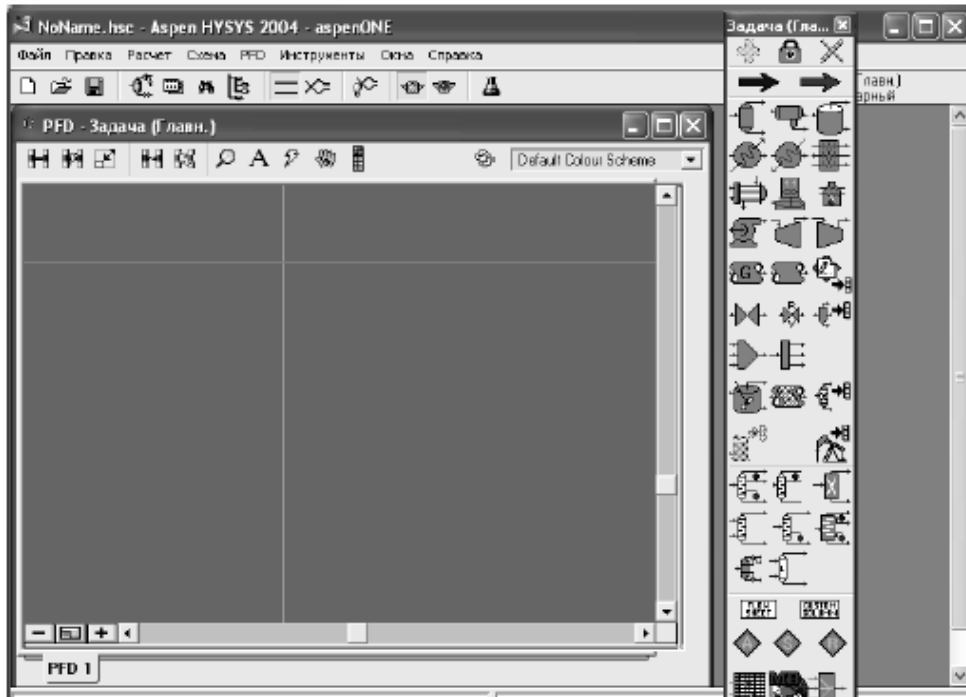


Рис. 5.12. Головне вікно програми Hysys

В додатку А наведений приклад моделювання процесу конверсії оксиду вуглецю в програмному середовищі Hysys.

5.3. Моделююча програма PROvision

PRO/II виконує розрахунки матеріальних і теплових балансів для широкого діапазону технологічних процесів від первинної переробки нафти і газу до реакційно-ректифікаційних процесів. PRO/II з PROvision дозволяє найбільш ефективно вирішувати задачі моделювання. Графічний інтерфейс користувача PROvision є повністю інтерактивною, зручною в використанні оболонкою для побудови і корегування як простих, так і найскладніших моделей PRO/II.

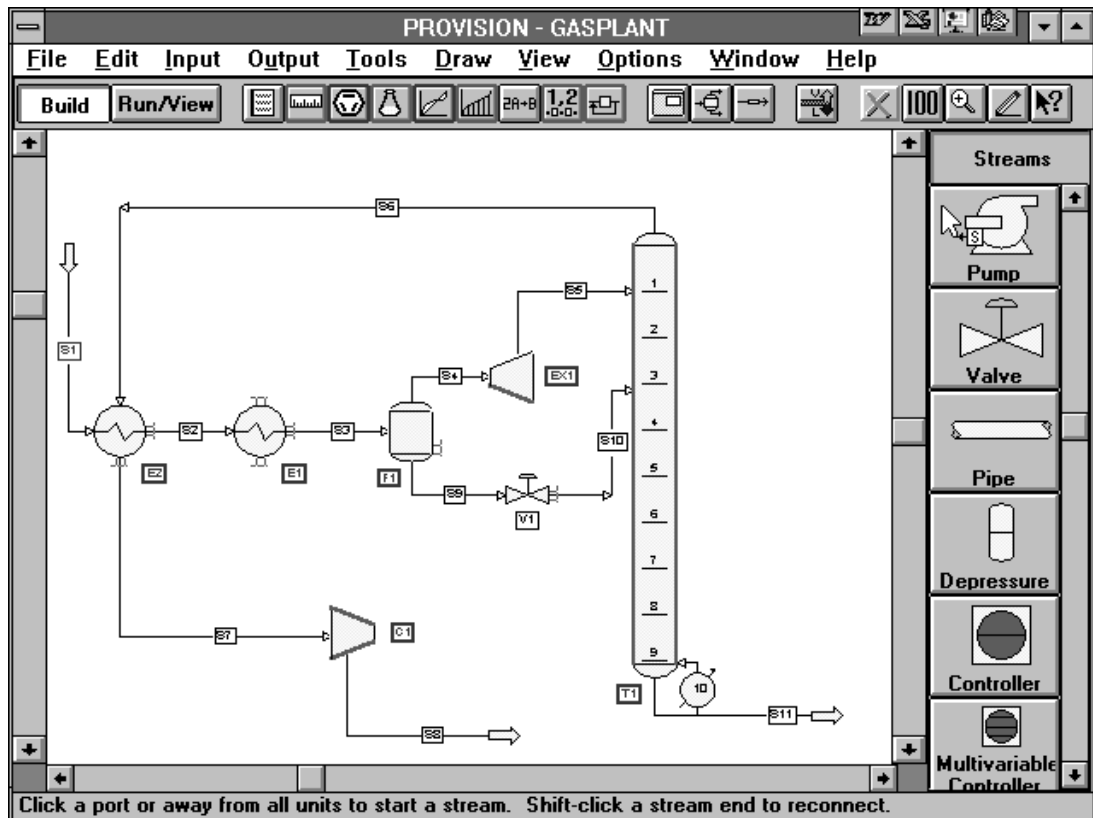


Рис.5.13. Головне вікно програми PRO/II

Застосування програми PRO/II

- 1) Галузі промисловості: - нафтопереробка; газопереробка; нафтохімія, хімія.
- 2) Задачі, для рішення яких застосовується програма PRO/II:

- проектування нових процесів;
- порівняння альтернативних варіантів установок;
- модернізація і реконструкція;
- оцінка відповідності технологій вимогам екології;
- розшивка вузьких місць і вирішення проблем експлуатації;
- оптимізація і збільшення виходу продуктів і прибутковості підприємства.

3) Типові процеси, які моделюються PRO/II.

<i>НАФТОПЕРЕРОБКА</i>	<i>ГАЗОПЕРЕРОБКА</i>
Атмосферна колона первинної перегонки нафти	Амінова очистка
Колона розподілу установи коксування	Установи каскадного охолодження
Основна колона каталітичного крекінга	Компресорні станції
Установка газорозділення	Деетанізатори і деметанізатори
Стабілізатор бензину	Сушіння газу
Установка вторинної перегонки бензину	Інгібування гідратуутворення
Очистка кислих стоків	Багатоступенева сепарація
Алкілірування в присутності H ₂ SO ₄ , HF	Цикли охолодження
Вакуумні колони	Оптимізація установки турбодетандирування

4) PRO/II вибір моделей.

4.1. Технологічні елементи (моделі хіміко-технологічних процесів та апаратів):

<i>УНІВЕРСАЛЬНІ МОДЕЛІ</i>	<i>РЕКТИФІКАЦІЯ</i>
Сепаратор	Електроліти
Полімерний сепаратор	Реакційно-ректифікаційні процеси
Дросель	Екстрактор
Компресор	Насадкові та тарілчасті колони
Дільник	Проектний гідравлічний розрахунок
Насос	Термосіфоний рибойлер
Трубопровід	Періодична ректифікація
Змішувач	Алгоритми CHEMDIST, SURE, Inside/Out

<i>ТЕПЛОБМІННИКИ</i>	<i>РЕАКТОРИ</i>	<i>ТВЕРДОФАЗНІ ПРОЦЕСИ</i>
Кожухотрубний	Реактор конверсії	Кристалізатор
Спрощений	Реактор ідеального витиснення	Розчинення
Аналіз зон теплопередачі	Реактор ідеального змішання	Відстійник
Крива нагріву (охолодження)	Будь-які кінетичні рівняння	Центрифуга
LNG	Реактор полімеризації	Барабанний фільтр
	Періодичний реактор	Сушка

4.2. Термофізичні властивості.

Банк даних чистих компонентів:

- більш 1800 компонентів;
- властивості твердих речовин;
- банк даних електролітів;
- компоненти, що задаються користувачем;

- псевдокомпоненти і розгонки;
- змішування;
- бібліотеки користувача;
- розрахунок властивостей по структурі;
- засіб Ван-Кревелена для полімерів.

Властивості сумішей:

- більш 3000 бінарних параметрів;
- спеціальні пакети: спирт, гліколі, кислі стоки;
- меркаптани.

Банки даних бінарних параметрів. Термодинамічні моделі.

4.3. Додаткові можливості:

- бази даних;
- процедури на Фортрані;
- калькулятор потоку;
- універсальний Фортран-калькулятор;
- необмежена кількість компонентів, потоку, апаратів і рециклів;
- стандартні специфікації і обмеження;
- підпрограми користувача;
- вивчення варіантів;
- спеціальні формати звітів;
- система передачі даних (PDTs);
- резервуар під тиском;
- ексергія;
- інтерфейс до програми Linnhoff-March SuperTarget.

4.4. Графічний інтерфейс PROvision:

- гнучкість завдання схеми і введення даних;
- різноманітні формати звітів;
- інтерактивний і пакетний режими розрахунку;
- контекстна допомога;
- кольорове кодування статусу даних;
- повна документація;
- параметри за замовчанням, що задаються користувачем;
- зручні засоби передачі даних.

4.5. Управління розрахунком схем:

- контролер;
- багатозмінний контролер;
- перехресні посилання;
- оптимізатор;
- засоби відомості рециклів;
- автоматичний вибір послідовності розрахунку;
- засіб прискорення Пройдена;
- засіб прискорення Вегштейна.

5.4. Програма Chemcad та її можливості. Спеціальні можливості аналізу ХТС в програмному середовищі Chemcad

Програма ChemCad, як і всі попередні, може моделювати хімічні, нафтохімічні, фармацевтичні та екологічні процеси. Цей продукт відрізняється від інших вищезгаданих програм тим, що в одному інтерфейсі реалізовано можливість моделювання як статички, так й динаміки процесів. Головне вікно програми наведено на рис. 5.14.

Програма ChemCad може моделювати хімічні, нафтохімічні, фармацевтичні та екологічні процеси. Цей продукт відрізняється від інших моделюючих програм тим, що в одному інтерфейсі реалізовано можливість моделювання як статички, так й динаміки процесів.

Крім звичайного розрахунку схеми або процесу, програма пропонує можливість аналізувати чутливість процесів, вирішувати задачі оптимізації, робити оцінку вартості. В програмі є спеціальний інтелектуальний засіб, що згідно вхідним даним пропонує найбільш релевантний метод розрахунку термодинамічних властивостей. Крім того, програма може працювати у взаємодії з зовнішнім джерелом даних – таблицями Excel. Із допомогою програми ChemCad, можна вирішити більшість задач, що виникають при розробці нових та вдосконаленні існуючих технологічних схем.

Початок нової роботи

Починати слід з відкриття нового проекту і присвоєння йому імені : **File - New Job**. Після введення імені і збереження проекту, відкривається головне робоче вікно ChemCad.

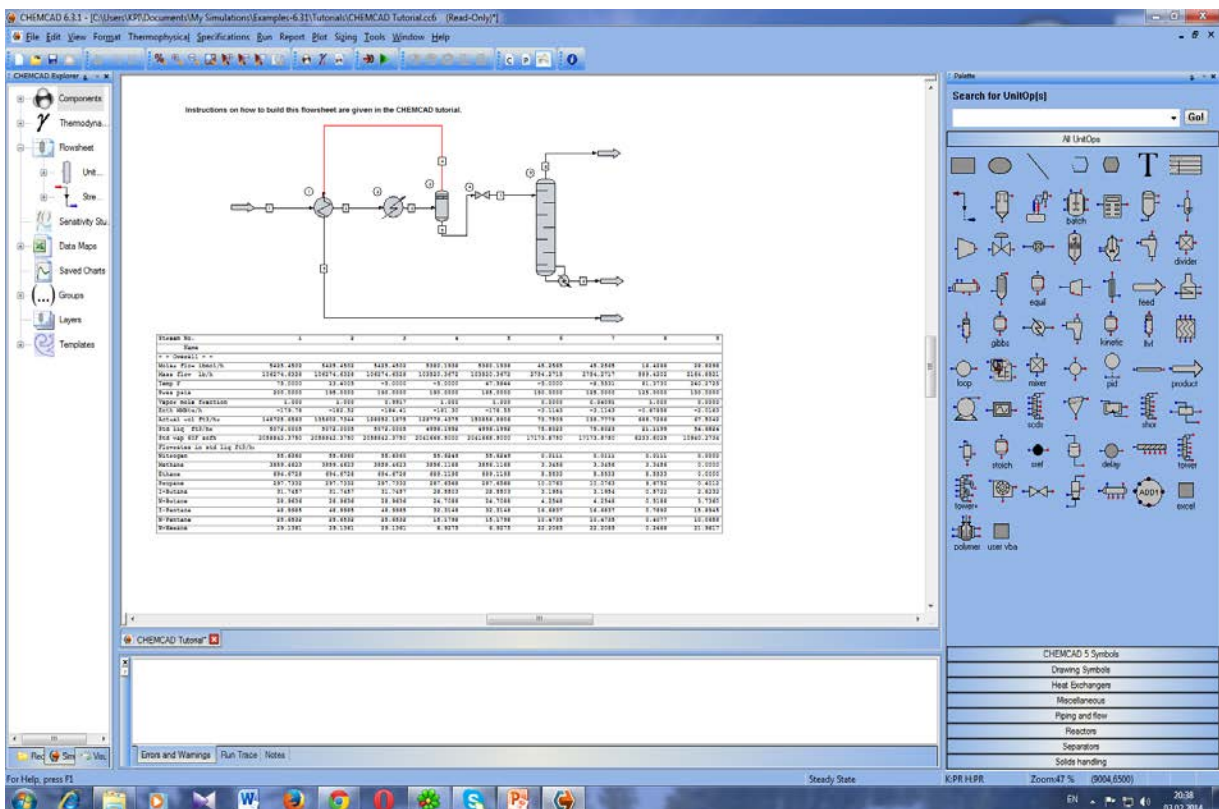


Рис. 5.14. Головне робоче вікно ChemCad 6.3.1

Основні команди ChemCad, що викликаються з головного меню:

- **File** – для керування файлом і друком.
- **Edit** – для зміни різних аспектів схеми.
- **View** – для контролю за різними параметрами відображення і малювання.
- **Format** – для зміни одиниць виміру, графічних налаштувань і імпортування.
- **Run Simulation/Edit Flowsheet** – для переключення режимів симуляції / редагування схеми.
- **ThermoPhysical** – для вибору компонентів, методів K -Значення ентальпійних методів для поточного проекту; для перегляду і редагування банку даних ChemCad.
- **Specifications** – для введення, редагування і маніпулювання потоком і даними процесів.
- **Run** – для запуску симуляції.
- **Results** – для перегляду розрахунків.
- **Plot** – для графічного відображення результатів розрахунків.
- **Output** – для підготовки звітів і діаграми процесів (PFD).
- **Sizing** – для калібрування і проведення розрахунків для різних типів устаткування.
- **Tools** – для виконання різних дій, зв'язаних з моделюванням. Це містить у собі регресію даних, CO₂ – попередня оцінка твердих тіл і рідин, TOD/COD розрахунки й ін.
- **Window** – для операцій з вікнами.
- **Help** – довідка.

Вибір одиниць виміру

Для вибору одиниць виміру для цієї схеми виберіть команду **Format**. Тепер виберіть параметр **End Units**, з'явиться наступне вікно:

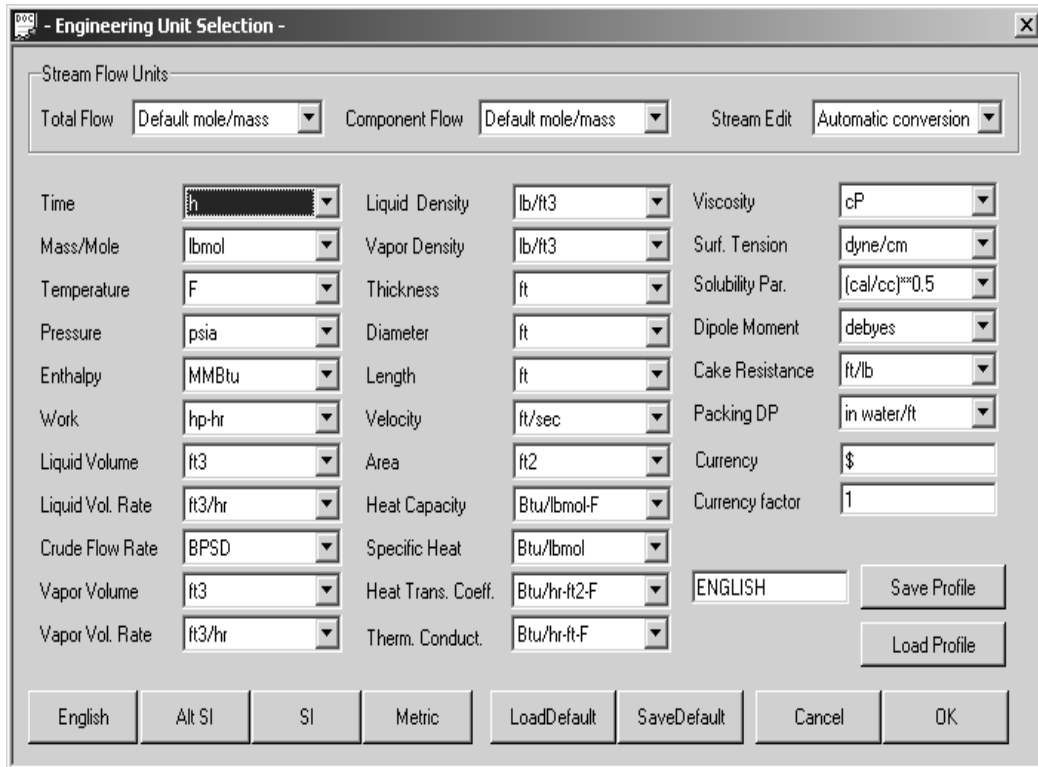


Рис. 5.15. Вікно вибіру одиниць виміру

Англійські одиниці виміру обираються за замовчуванням. Є можливість змінити натисканням на одну з чотирьох кнопок English, Alt SI, SI чи метричні. Також можна змінювати будь-які одиниці індивідуально.

Вибір компонентів

Тепер треба визначити, які компоненти будуть використовуватися в цій симуляції. Це робиться за допомогою команди *ThermoPhysical*, що викликається чи мишею, чи клавішами [ALT + L] (перед цим натиснути команду *Run Simulation*). Відкриється наступне меню:

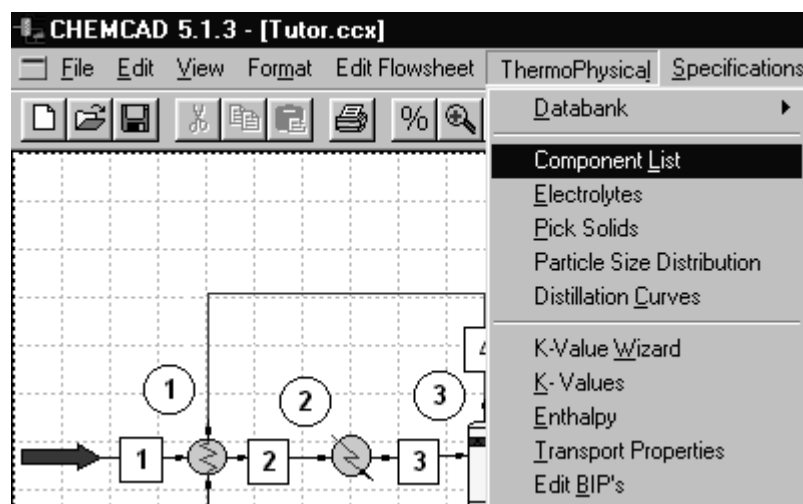


Рис. 5.16. Перехід до вікна вибору компонентів потоків

Для вибору компонентів зі стандартного банку даних ChemCad , виберіть мишею опцію *Component List*. З'явиться наступне діалогове вікно вибору компонентів (*Component Selection dialog box*). Воно організовано в такий спосіб:

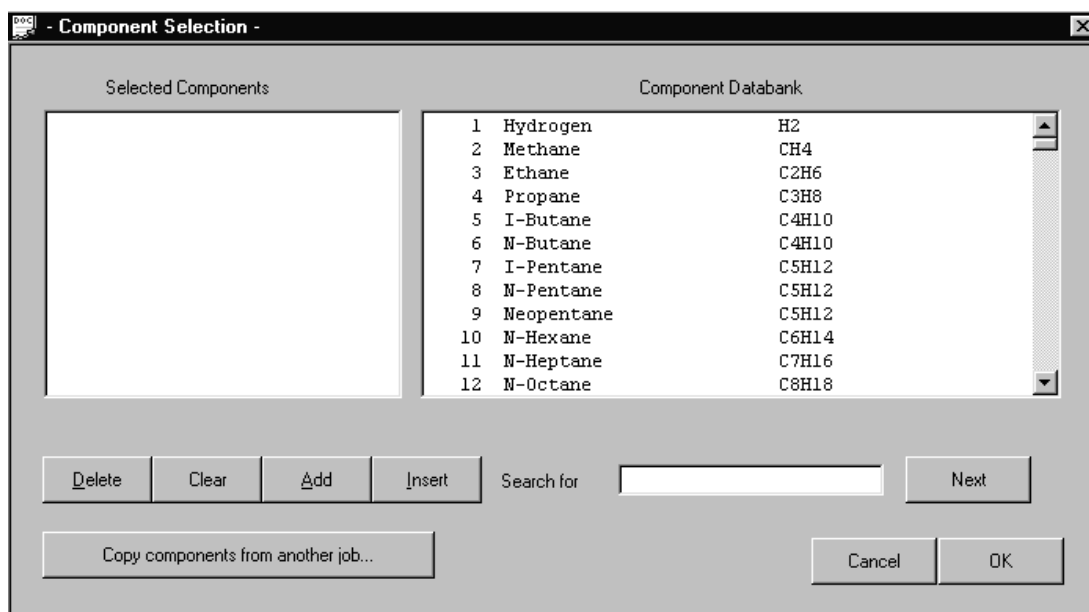


Рис. 5.17. Вікно вибору компонентів (речовин) потоків

Область обраних компонентів (*'Selected Components'*): відобразитися поточний список використаних компонентів у цій області.

Область компонентів банку даних (*'Component Databank'*): усі компоненти, що зберігаються в банку (банках) даних відображені тут. Компоненти розташовані відповідно до їх порядкових (ID) номерів. Коли ця область активна, один з компонентів виділяється синім кольором.

Поле виділення рядка (*'Selection String'*): ця область використовується для визначення місця розташування компонента в банку даних. Якщо місце розташування бажаного компонента уже визначено, він додається до списку компонентів схеми (*Flowsheet component list*) подвійним клацанням миші на ньому чи за допомогою виділення його і натискання на клавішу додавання (*Add*). Програма знаходить компоненти, порівнюючи їх із введеними в поле словами. Рядок може мати будь-які буквено-цифрові комбінації. Рядок буде зрівняний з усякою частиною порядкових (ID) номерів, формулою чи синонімом (ім'я компонента), розташованим у банку даних. Якщо ви друкуєте рядок, програма автоматично знаходить і виділяє найбільш близькі за змістом компоненти.

Кнопка 'Наступний' (*'Next'*): якщо поточний знайдений компонент це не те, що ви шукаєте – натисніть кнопку *'Next'* щоб знайти наступний варіант порівняння.

Кнопка 'Додати' (*'Add'*): натискання на цю кнопку додасть виділений компонент у кінець списку компонентів схеми. Компоненти можуть бути обрані подвійним клацанням миші на них. Виділений компонент з'явиться в списку, показаному в області обраних компонентів (*Selected Component Area*).

Кнопка ‘Виділити’ (‘Insert’): ця кнопка використовується для виділення компонента де-небудь у списку компонентів, переважніше чим доповнення в кінець списку.

Кнопка ‘Очистити’ (‘Clear’): використовується для видалення цілого списку компонентів. Після натискання цієї кнопки, усі компоненти зі списку області обраних компонентів (*Selected Components Area*) будуть стерті.

Кнопка ‘Видалити’ (‘Delete’): використовується для видалення окремих компонентів зі списку компонентів. Для використання цієї опції виділіть компонент в області обраних компонентів (*Selected Components Area*) і натисніть кнопку ‘Delete’.

Для демонстрації виділення виділимо Nitrogen (Азот). Спочатку натисніть на поле виділення рядка (*Selection String Field*), потім надрукуйте рядок ‘Nitrogen’. Коли ви введете рядок, програма знайде і виділить компонент nitrogen. Для додавання компонента в список клацнемо двічі на ньому чи натиснемо кнопку ‘Add’. Компонент з’явиться в області обраних компонентів (*Selected Components Area*).

Тепер виберіть інші компоненти в список компонентів. Не забувайте про кнопку ‘Наступний’ (‘Next’). Знайдіть наступні компоненти і додайте їх у список компонентів:

- 2 Methane
- 3 Ethane
- 4 Propane
- 5 I-butane
- 6 N-butane
- 7 I-pentane
- 8 N-pentane
- 9 N-hexane

Діалогове вікно повинне виглядати тепер так:

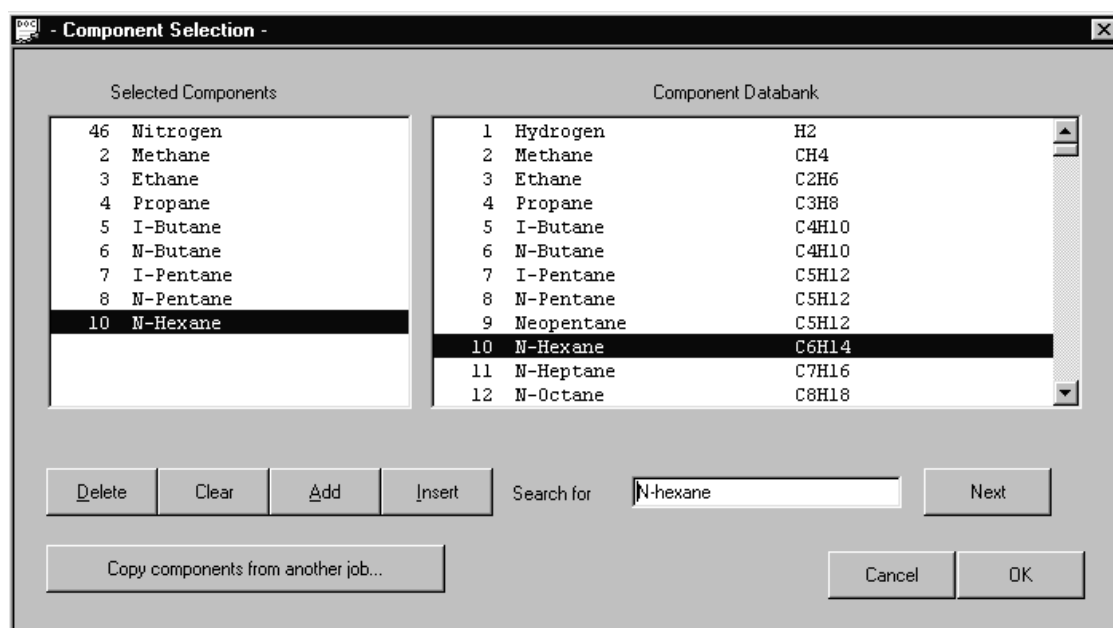


Рис. 5.18. Вікно вибору компонентів із обраними речовинами потоків

Збережемо тепер наш список натисканням клавіші ‘OK’.

Вибір термодинамічних параметрів

Вибір термодинамічних параметрів по-простому означає вибір моделі чи методу розрахунку паро-рідинного (пара-рідина-рідина) фазової рівноваги (*K-параметр*) і вибір методу чи моделі для розрахунку теплового балансу (ентальпійний параметр). Робиться це за допомогою команди *ThermoPhysical*, розташованої в меню (Це аналогічно використаній вище команді *Command List*).

ChemCad має в бібліотеці близько 50 *K-моделей* з безліччю параметрів і близько 12 ентальпійних моделей. Іноді важко зробити правильний вибір з цих бібліотек. Дивіться розділ *Thermodynamics* у on-line довідці. До того ж ChemCad має систему, що допомагає користувачу в цьому виборі. Функція *Thermo Wizard* також описана в розділі *Thermodynamics* у on-line довідці. Оскільки результати допускають термодинамічний вибір і у використанні *Thermo Wizard* далекі від рамок цього навчального посібника, давайте припустимо, що ми знаємо про необхідність використання *Peng-Robinson* методу для обох *K-* і ентальпійних розрахунків. У цьому випадку ми могли б продовжити в такий спосіб.

По-перше, нам необхідно вибрати нашу *K- модель*, клацаючи на *K-values* параметрі у відображеному меню. З'явиться діалогове вікно *K-value Options*. У лівому верхньому куті вікна буде combo box за назвою *Global K-values Option*, що уже виділений. Відкрийте вікно, клацнувши по ньому. Ваше вікно буде виглядати в такий спосіб (рис. 5.19).

Для вибору методу *Peng-Robinson* знайдіть його в списку і натисніть на нього лівою клавшею миші. Вікно закриється і *Peng-Robinson* буде відображено в полі.

Інші параметри на цьому вікні зараз для нас не важливі. Збережемо виконані дії, клацнувши ОК у лівому верхньому куті. Це поверне нас у меню *Simulation Menu Bar*.

Тепер виберемо ентальпійну модель. Для цього знову клацніть на *ThermoPhysical*, потім клацніть на *Enthalpy*. З'явиться діалогове вікно *Enthalpy Options*. Ви помітите, що метод *Peng-Robinson* вже обраний. Програма автоматично використовує цю ентальпійну модель, після вашого вибору *Peng-Robinson K-value*. Якщо це припущення помилкове, ви можете його зараз виправити. У нашому випадку, ми хочемо використовувати цю модель, тому клацаємо ОК у лівому верхньому куті екрана. Це закриє діалогове вікно *Enthalpy Options*, зберігши поточні параметри.



Рис. 5.19. Вікно вибору термодинамічної моделі

Побудова та редагування схем

При створенні діаграм треба працювати з наступною палітрою (рис.5.20).

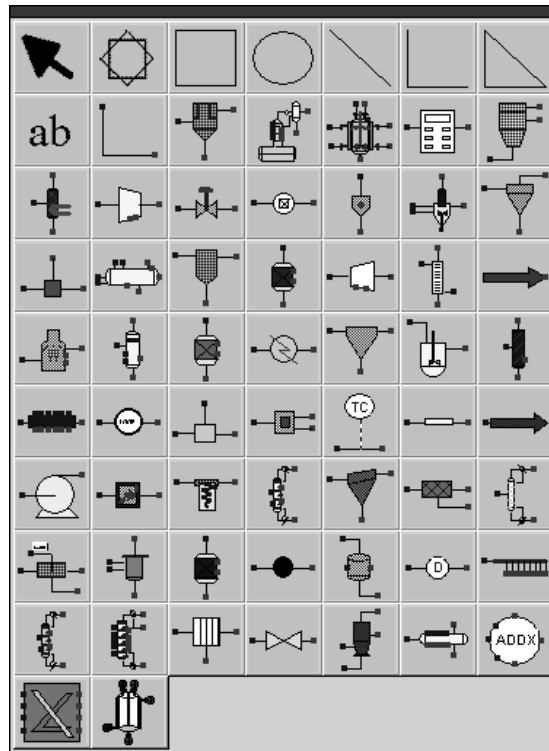


Рис. 5.20. Вікно вибору елементів технологічної схеми

Опишемо палітру схем на рис. 5.20:

- перший бокс викликає курсор, якщо той необхідний;
- другий бокс дозволяє обертати користувачу об'єкти на схемі.

Наступні 5 боксів (по горизонталі) дозволяють користувачу малювати примітиви на схемі.

- “*ab*” (восьмий) бокс – для вставки тексту на схему;
- дев'ятого бокса – для малювання потоків процесу.

Ліва кнопка миші – для активації зазначеної функції.

Права кнопка миші – для виклику додаткових опцій.

Головну палітру можна включити\виключити за допомогою команди *View\Main Palette*, за допомогою *Run Simulation* чи натисканням на кнопку *S\G Power button*.

Розмір і форму головної палітри можна змінювати за допомогою команд *View\Palette Settings*.

На зображеннях входи показані маленькими блакитними квадратами, а виходи – маленькими коричневими.

Наша задача зараз створити топологію схеми.

Ми почнемо з поміщення піктограм модулів процесу в робочій області вікна. ChemCad вимагає, щоб кожен потік виходив з якогось елемента і входив у який-небудь. Тому ми повинні помістити піктограму *Feed* (живлення) у схему, щоб вона служила джерелом живильного потоку.

Далі необхідно виконати наступну послідовність кроків:

- 1) Клацніть правою кнопкою миші на іконці живлення (*feed box*). З'явиться під-палітра живлення. Тепер клацніть правою клавішею миші на іконці живлення на головній палітрі знову. Під-палітра зникне. У такий спосіб викликається і закривається під-палітра.
- 2) Натисніть лівою клавішею миші на іконці живлення (*feed box*) на головній палітрі, потім укажіть його місце розташування на схемі і знову натисніть ліву клавішу миші для фіксації.

Для цілей інструкції досліджуємо деякі опції, зв'язані з іконкою живлення (*feed box*).

а) Для переміщення символу:

- наведіть курсор на іконку;
- натисніть на ліву клавішу миші;
- з натиснутою лівою клавішею перемістіть іконку вгору приблизно на дюйм і відпустіть ліву клавішу. Позиція іконки зміниться.

б) Може бути необхідним перемістити палітру, щоб одержати доступ до іконки. Ви можете це зробити, клацнувши і перетягнувши палітру за коричневу смужку в самому верху вікна.

в) Для перегляду параметрів редагування об'єкта: помістіть курсор над іконкою (на схемі, а не на палітрі) і натисніть праву клавішу миші.

г) Для переміщення і розтягування об'єкта: клацніть лівою клавішею миші на іконці так, щоб навколо іконки відобразилися границі. Клацніть на одній із границь і потягніть її. Іконка збільшиться чи зменшиться в розмірах у залежності від того, куди ви потягнете границю.

Зараз ми помістимо два теплообмінники (*heat exchanger*) на схему. Слідуйте зазначеним нижче інструкціям:

1) Натисніть на палітрі правою клавішею миші на зображення теплообмінника (*heat exchanger*) – з'явиться додаткове меню (5.21).

2) Натисніть на зображення двостороннього теплообмінника (*two sided heat exchanger*), як це показано нижче. Палітри зникнуть, і знову з'явиться маленький квадратний курсор.

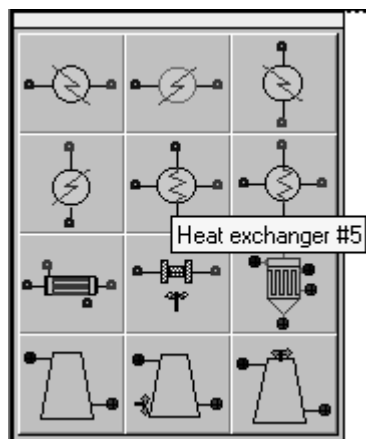


Рис. 5.21. Вікно вибору конкретного апарату (1-го теплообмінника)

3) Розташуєте курсор на півтора дюйма правіше зображення живильника. Натисніть ліву клавішу миші. Зображення теплообмінника розташується на схемі, і знову з'являться палітри.

4) Тепер натисніть на палітрі лівою клавішею миші на зображення горизонтального однобічного теплообмінника (*one sided heat exchanger*). Палітри зникнуть, і знову з'явиться маленький квадратний курсор (5.22).

5) Розташуєте однобічний теплообмінник на схемі на півтора дюйма правіше двостороннього.

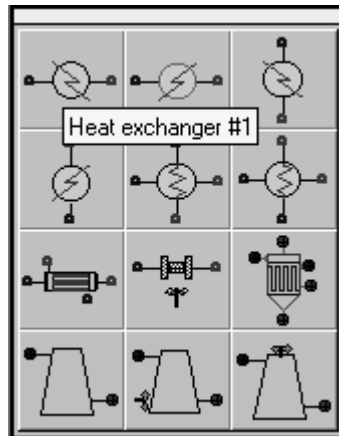


Рис. 5.22. Вікно вибору конкретного апарату (2-го теплообмінника)

6) Тепер закриємо додаткове меню клацанням правої клавіші миші на зображенні теплообмінника на головній палітрі. Наступна процедура установка передавального резервуара і клапана на схему.

Для конденсування стабілізатора ми будемо використовувати дистиляційну колону. Модуль, який ми хочемо використовувати, це дистилятор *Tower* (колонна). Він знаходиться на палітрі (рис. 5.23).

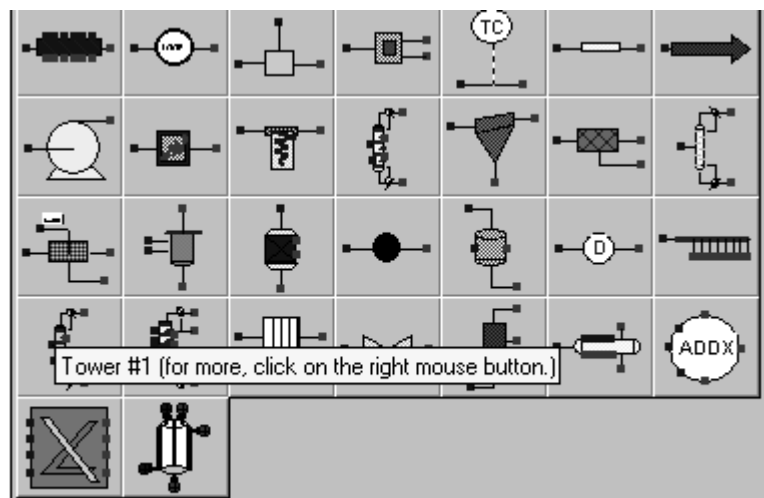


Рис. 5.23. Вікно вибору колони

Оскільки ми хочемо використовувати Tower, що має нагрівач, але не має конденсатора (*Reboiled Tower w/o Condenser*), ми повинні використовувати додаткову палітру. Натисніть правою клавішею миші на зображенні *Tower* – з'явиться додаткова палітра. Натисніть на необхідному зображенні *Tower* лівою клавішею миші і додайте його на схему (рис. 5.24).

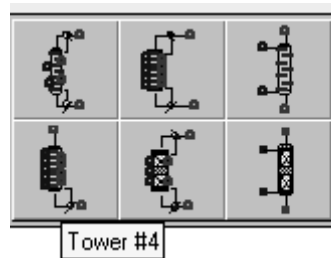


Рис. 5.24. Вікно вибору конкретного типу колони

Закрийте додаткове меню натисканням правої клавіші миші на зображенні *Tower* на головній палітрі.

І, нарешті, нам необхідно помістити на схему три зображення *Product* (продукт) на кожен потік продукту. Зображення *Product* на палітрі знаходиться трохи правіше і нижче центра.

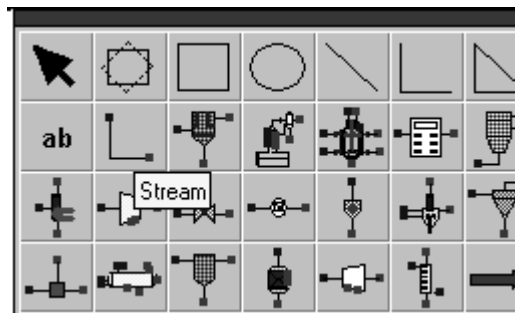


Рис. 5.25. Розміщення потоків на палітрі

Розміщення потоків на схемі

Настав час з'єднати конструкційні одиниці потоками. Для цього натисніть на головній палітрі на зображення боксу *Streams* (рис. 5.25).

Нижче кілька загальних правил малювання потоків на схемі :

- 1) Кожен потік йде від елемента - джерела до зазначеного елемента.
- 2) Кожен конструкційний елемент має вхід і вихід.
- 3) Коли створюється потік, курсор виглядає як маленький хрестик. Коли курсор знаходиться біля вихідної позиції, він перетворюється в чорну стрілку. Коли це трапляється натисніть лівою клавішею миші для запуску потоку, якщо ви хочете щоб це була стартова позиція.
- 4) Коли закінчене підведення потоку до елемента, курсор стане чорною стрілкою. Коли курсор знаходиться біля вихідної чи вхідної позиції, з'явиться напис, що говорить про місце розташування і про номер позиції.
- 5) Якщо бажана позиція вже встановлена (як показує напис, що з'являється), вам необхідно натиснути лівою клавішею миші для завершення створення потоку.

6) На час малювання потоку палітра зникне. Вона з'явиться тільки після того, як ви клацнете лівою клавішею миші де-небудь на схемі (не на точках виходу чи входу потоків). Ви не повинні клацати на зображення потоку щораз як хочете почати новий потік.

7) Коли ви змінюєте напрямки потоку в перший раз, ChemCad дозволить це зробити без усяких проблем. Для кожної нової зміни напрямків потоку ви повинні спочатку натисканням лівою клавішею миші створити прив'язку до точки, через яку повинний буде проходити потік.

Використовуючи вищевказані правила з'єднаємо конструкційні елементи за допомогою потоків.

Натисніть на зображення *Streams* (потоки) на головній палітрі. Палітра зникне, а з'явиться хрестик курсору. Перемістіть курсор до закінчення живильної стрілки. Коли курсор стане чорною стрілкою, натисніть ліву клавішу миші. Підведіть цей потік до лівого входу першого теплообмінника (з'явиться напис) і знову натисніть ліву клавішу миші. ChemCad створить номер потоку на схемі. Нумери ці створюються послідовно, тому номер створеного потоку 1. Ви можете змінити його, використовуючи *Edit Streams* меню (викликається натисканням правою клавішею миші на потік).

Тепер намалюємо другий потік. Підведіть курсор близько до правого виходу першого теплообмінника – курсор перетвориться в чорну стрілку. Натисніть ліву клавішу миші. Підведіть цей потік до входу в другий теплообмінник і знову натисніть ліву клавішу миші. Це буде потік номер 2.

Потік номер 3 буде з'єднувати вихід другого теплообмінника з входом передавального резервуара.

Потік номер 4 почніть від вершини передавального резервуара і продовжіть вгору приблизно на дюйм, а потім вліво, поки не з'явиться над першим теплообмінником. Тепер спробуйте завернути потік униз. Ви помітите, що не можете цього зробити, тому що вся створена лінія опускається вниз. Нам необхідно прив'язати лінію до точки перед тим як робити поворот. Для цього необхідно натиснути ліву клавішу миші. Тепер малюємо потік униз до верхньої частини теплообмінника. Коли з'явиться напис входу натисніть ліву клавішу миші. Використовуючи цю процедуру створіть потоки, що залишились, щоб ваша схема виглядала як на рис. 5.26.

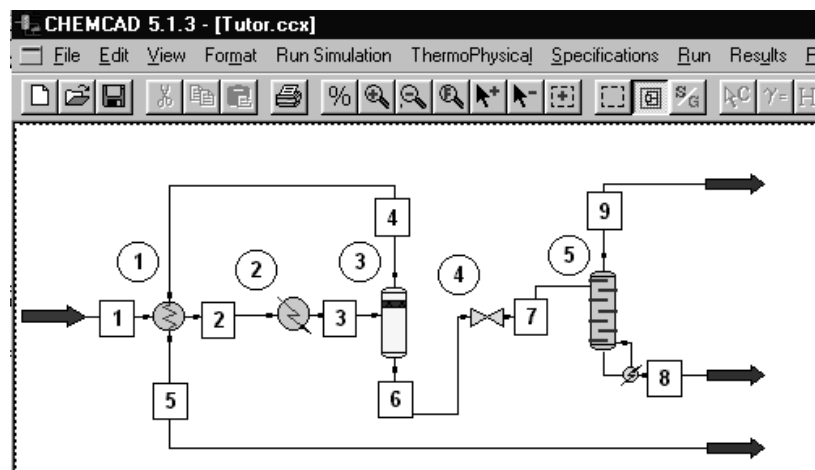
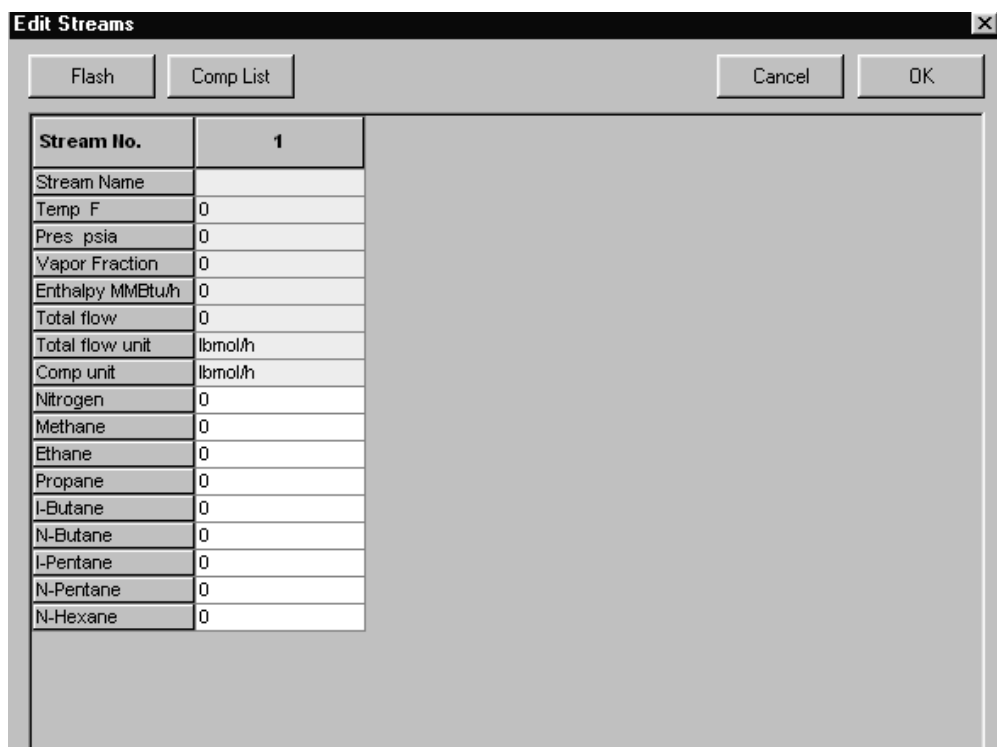


Рис. 5.26. Розміщення потоків на схемі

Визначення вхідних потоків

Для визначення живильних потоків використовують команду *Specifications* з бар меню чи подвійним клацанням миші прямо на потоці, для якого ми це робимо. Клацніть двічі на потік 1. З'явиться діалогове вікно *Edit Streams* (рис. 5.27).



Stream No.	1
Stream Name	
Temp F	0
Pressure	0
Vapor Fraction	0
Enthalpy MMBtu/h	0
Total flow	0
Total flow unit	lbmol/h
Comp unit	lbmol/h
Nitrogen	0
Methane	0
Ethane	0
Propane	0
I-Butane	0
N-Butane	0
I-Pentane	0
N-Pentane	0
N-Hexane	0

Рис. 5.27. Вікно для введення (редагування) значень параметрів потоків

- Перше поле – *Stream Name* – дозволяє ввести підпис чи ім'я потоку. Це ім'я може мати до 16 буквено-цифрових символів і з'явиться на схемі після закриття діалогового вікна.
- Наступні чотири поля: температура, тиск, парова фаза і ентальпія – термодинамічні властивості потоку. Відповідно до правила фаз Гіббса, якщо склад уже відомий, то точно визначивши будь-які два з чотирьох термодинамічних властивостей суміші, знайдемо два, що залишилися. Так, знайдені склад, температура і тиск, визначають єдині значення парової фази і ентальпії (це справедливо тільки для суміші). Чи ж знайшовши склад, тиск і ентальпію, знайдемо єдині значення температури і парової фази.
- ChemCad, до речі, не дає багато свободи для цього. Оскільки ентальпії розраховуються відповідно до даної величини, розрахунок ентальпії будь-якого узятого потоку схильний до помилок. Тому ChemCad не дозволяє вводити ентальпію потоку. (Існує одне виключення для цього правила: коли повна швидкість потоку дорівнює нулю, уведення ентальпії в потік може бути альтернативним шляхом додавання тепла в компонент.) Тому, щоб визначити однозначно потік у ChemCad, користувач повинний визначити склад потоку і будь-які два параметри з наступних: температура, тиск і парова фаза. Це справедливо для суміші. Для чистого компонента іноді вимагаються всі три

термодинамічних параметри.

- Поля *Total Flow Units* і *Comp Units* працюють разом для надання можливості користувачу визначати склади потоків різними шляхами. Якщо *Comp Units* установлені на молярну, масову чи об'ємну частку (що може бути зроблене локально чи глобально), то стане доступним *Total Flow combo box*. Якщо ж *Comp Units* установлені як потік чи кількість, то загальна витрата стає сумою витрат компонентів і *Total Flow combo box* стане доступним для редагування.
- Якщо *Comp Units* установлені на кількість витрати елемента (на противагу до молярної, масової чи об'ємної часток), то коли вводяться значення витрати компонента, вони автоматично сумуються і поточна сума відображається в поле з назвою *Total Flow*.
- У правому верхньому куті діалогового вікна знаходиться кнопка *Flash*. Клацання по ній в будь-який час, приведе до проведення швидких розрахунків, використовуючи поточні склад і термодинамічні властивості. Це дозволяє швидко робити розрахунки не залишаючи діалогового вікна.
- Частки, що не сумуються до 1.0 автоматично нормалізовані при конденсації / випаруванні чи виході з діалогового вікна.

Тепер введемо дані. Давайте почнемо з температури. Будь ласка, клацніть на поле температури.

Коли виділите потрібне поле, наберіть 75. Натисніть кнопку ↓ - виділиться поле тиску. Уведіть 200 у цьому полі.

Потім давайте перейдемо до поля *Nitrogen*. Натисніть на ньому лівою клав'яшею миші і введіть 100.19 у цьому полі.

Подібним чином уведіть наступні числа у відповідні поля:

Metane	4505.48
Ethane	514
Propane	214
I-butane	19.2
N-butane	18.18
I-pentane	26.4
N-pentane	14
N-hexane	14

Збережемо цю інформацію про потоки, натиснувши кнопку *OK* у лівому верхньому куті діалогового вікна. Отже ми вже готові до введення параметрів устаткування.

Введення параметрів устаткування та розрахунок ХТС

Розглянемо як треба працювати із модулями схеми та здійснювати процес моделювання схеми вцілому.

1) Визначення першого теплообмінника

Подібно потокам, параметри устаткування можна ввести, використовуючи як команду *Specifications*, у випадаючому меню, так і подвійним клацанням прямо на компоненті, який ми хочемо визначити. Клацніть двічі на першому теплообміннику тепер. З'явиться діалогове вікно введення (рис. 5.28).

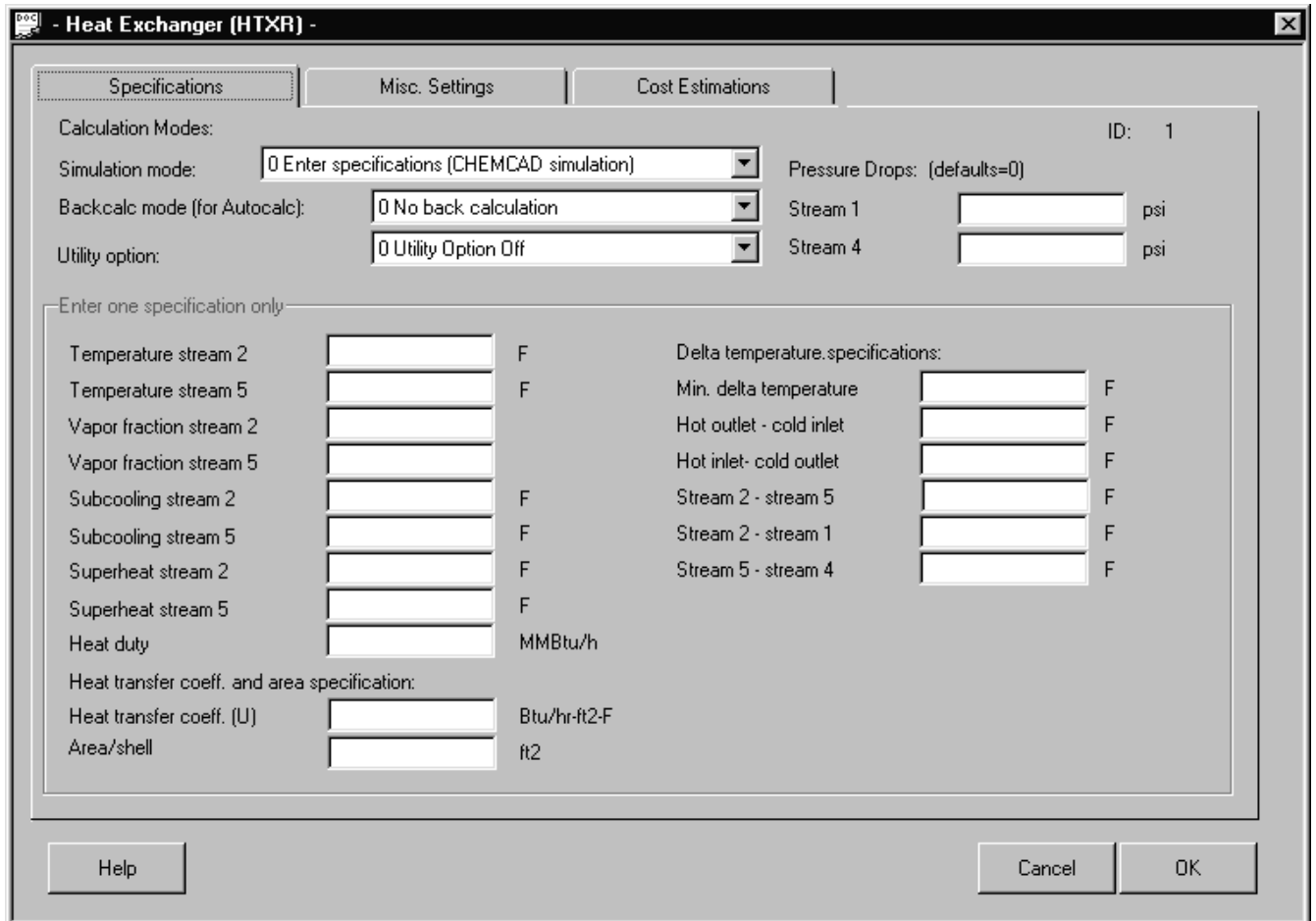


Рис. 5.28. Задання специфікацій першого теплообмінника

Це вікно містить вкладки: *Specifications*, *Misc. Settings* і *Cost Estimations*.

2) Заповнюємо вікно

Падіння тиску для обох сторін теплообмінника **5** psi; тому вводимо **5**, потім клацаємо на іншому полі падіння тиску, що підписано так: *Stream 4* (Потік 4). Вводимо також **5**.

Нам необхідно визначити вихід першого потоку для точки роси. Ми зробимо це, визначивши вихід парової фракції **1**. Перейдіть до поля *Vapor Fraction Stream 2* (Потік парової фази 2) і введіть **1**.

Введення даних для цього компонента закінчений. Тепер треба зберегти інформацію і закрити діалогове вікно. Для цього натисніть кнопку *OK*.

3) *Визначення другого теплообмінника*

Тепер ми можемо вибрати наступний компонент для введення даних. Клацніть двічі на другому теплообміннику. З'явиться меню для однобічного теплообмінника (рис. 5.29).

The screenshot shows a software dialog box titled "Simple Heat Exchanger (HTXR)". It has three tabs: "Specifications", "Utility Rating", and "Cost Estimations". The "Specifications" tab is selected. The dialog contains several input fields and a dropdown menu. The "Pressure drop" field is followed by "psi". The "ID" is set to "2". A section titled "For design mode, enter only ONE of the following:" contains six rows, each with a text label, an input field, and a unit: "Temperature of stream 3" (F), "Vapor fraction of stream 3", "Subcooling stream 3" (F), "Superheat stream 3" (F), "Heat Duty" (MMBtu/h), and "Delta T stream 3 - stream 2" (F). Below this is a "Backcalc Mode (for Autocalc):" dropdown menu set to "0 No back calculation". At the bottom, there are four more rows with labels and input fields: "Calculated Heat Duty" (MMBtu/h), "LMTD (End points)" (F), "LMTD Corr Factor", and "Utility Flowrate (see Rating Case)" (lb/h). At the very bottom are three buttons: "Help", "Cancel", and "OK".

Рис. 5.29. Задання специфікацій другого теплообмінника

Температура виходу з цього теплообмінника буде визначати кількість рідини, переміщеної у випарну камеру.

Це визначить крикондентерм точки роси вихідного газу. Таким чином, це визначення – один із ключових параметрів нашого рішення. Як перше наближення, давайте оцінимо вихідну температуру в **-5 F**. Уведіть **5** у поле *Pressure Drop* (падіння тиску) і **-5** у поле *Temperature of Stream 3*. Натисніть кнопку **OK** для збереження даних і закриття діалогового вікна.

4) *Визначення випарної камери*

У нашому прикладі, випарна камера - це сепаратор пари і не вимагає ніяких визначень. Тому нам не треба вводити нічого для цього компонента.

5) *Визначення клапана*

Давайте введемо вихідний тиск для клапана. Клацніть двічі на клапані – з'явиться діалогове вікно клапана. Оскільки наш вихідний тиск для цього компонента **125 psia**, уведіть **125** у поле *Pressure Out* і натисніть **OK**.

6) Визначення вежі-стабілізатора

Клацніть двічі на компоненті вежі (*Tower*). З'явиться діалогове вікно *TOWER Distillation Column*. На ньому – п'ять закладок.

На першій сторінці ми повинні ввести *top pressure* (максимальний тиск), що складає **125 psia**; *column pressure drop* (падіння тиску колони), що складає **5 psi**; *number of stades* (кількість стадій), число яких **12** і *feed stage location* (розташування живильного етапу), номер етапу **1**. Заповніть вікно, як показано нижче (рис.5.30).

The screenshot shows a dialog box titled "TOWER Distillation Column" with a tabbed interface. The "General" tab is selected, and the "General Model Parameters" section is active. The parameters are as follows:

Parameter	Value	Unit
Condenser type	0 Total or no condenser	
Subcooled temp.		F
Top pressure	125	psia
Cond press drop		psi
Colm press drop	5	psi
No. of stages	12	
Feed stages:		
Feed tray for stream	7 1	

Buttons: Help, Cancel, OK.

Рис. 5.30. Задання специфікацій колони

Давайте продовжимо введення даних на наступній вкладці. Клацніть на *Specifications*. На цій сторінці ми визначаємо колону. У нас немає ні конденсаторів, ні бічних потоків у цій колоні, тому ми будемо визначати тільки нагрівач (*reboiler*).

Спочатку необхідно визначити спосіб дії нашого нагрівача. Клацніть лівою клавішею миші на поле *Select Reboiler Mode* – список покаже доступні параметри.

Як показано на рис.5.30, нам треба визначити швидкість потоку на дні цього компонента, що є *Mode No. 4*. Тому клацніть лівою клавішею миші на *4 Bottom mole flowrate*. Список закриється й у поле буде зараз написано *4 Bottom mole flowrate* (4 молярна швидкість на дні).

Тепер нам необхідно визначити чисельне значення швидкості потоку. Це робиться в полі праворуч, що відкривається після наших змін. Клацніть лівою клавішею миші на поле – воно повинне виділитися, і ми зможемо ввести значення **20**.

Тепер перейдемо до останньої закладки цього вікна, клацнувши *Convergence*. Як ви можете бачити, усі введення на листі опціональні. Тому для демонстраційних цілей давайте введемо значення **50 F** для температури у верхній частині і **150 F** для

температури нижньої частини. Клацніть на поле T_{top} і введіть значення 50, а в поле T_{bottom} введіть 150.

Тепер ми вже закінчили введення даних по вежі. Давайте збережемо ці дані, натиснувши *OK*. Коли ви це зробите, то з'явиться попереджуваче повідомлення, що говорить, що ви не ввели значення для швидкості дистиляції. У діалоговому вікні програма запитас вас, чи хочете ви проігнорувати попередження. Клацніть *YES*. Це поверне вас до *Simulation Window*. Усі дані для схеми тепер уже введені.

7) Запуск моделювання

Для запуску симуляції клацніть команду *RUN* у головному меню (рис. 5.31).

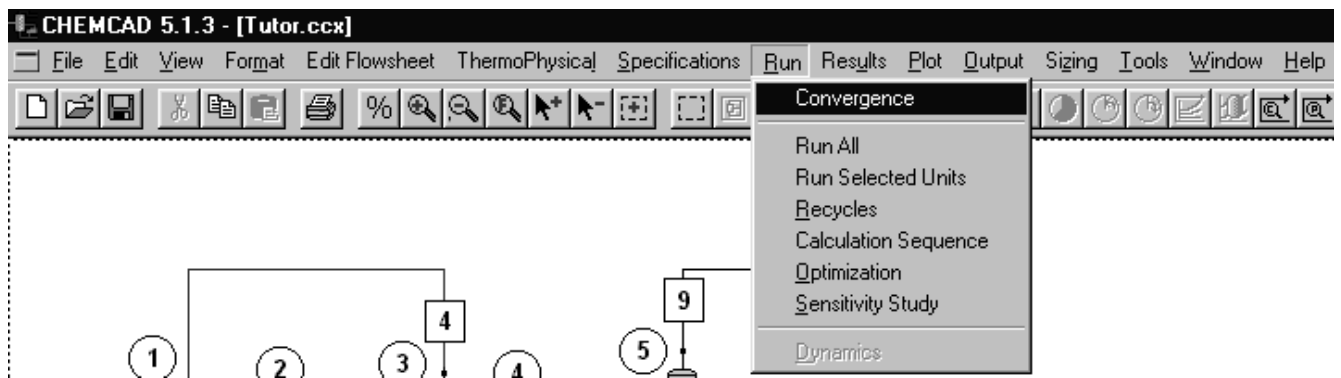


Рис. 5.31. Запуск програми на розрахунок схеми

Ми запускаємо розрахунок *steady state* (стан рівноваги), тому оберемо *Run All*. Програма спочатку перевірить ще раз дані і видасть список усіх помилок і/чи попереджень у вікні. У цьому випадку нам необхідно не мати помилок. Також у нас будуть повідомлення, які говорять, що ми не задали деяких оцінок. Ми можемо проігнорувати ці повідомлення і продовжити, клацнувши клавішу *YES*. Розрахунки продовжаться.

До закінчення з'явиться *Message Box* з повідомленням "*Recycle calculation has converged*" (Ітерації зійшлися). Для закриття діалогового вікна й очищення вікна натисніть кнопку *OK*.

Процес моделювання завершено. Далі можна аналізувати отримані результати із використанням пункта меню *Results*.

5.5. Спеціальні програмні засоби дослідження властивостей хіміко-технологічних процесів та оцінювання їх впливів на оточуюче середовище

Принцип еко-ефективності виробництв націлений на підтримку більш ефективного використання сировини та енергії для зниження економічних витрат та екологічного впливу виробництв та процесів. Так званий еко-дизайн так само має внести свій вклад у сталий розвиток, оскільки етап розробки процесів грає важливу роль для підвищення цієї еко-ефективності.

На сьогодні, викиди та відходи оцінюються в термінах впливів. Деякі екологічні критерії класифіковані у оцінюванні життєвого циклу (*LCA*). Вибір критеріїв не є фіксованим та може варіюватись під час проектування у відповідності із проектними потребами. Оскільки забезпечити всю необхідну інформацію для розрахунку критеріїв (індикаторів) на ранній стадії розробки процесу досить складно, з'явилися підходи націлені на розробку балансу навколишнього середовища. Один з таких методів – це алгоритм назвою зниження викидів, відомий під *WAR (Waste Reduction Algorithm)*, розроблений *USEPA*. Алгоритм базується на концепції балансу навколишнього середовища подібно до матеріальних та енергетичних балансів.

На відміну від оцінювання життєвого циклу, цей метод застосовується тільки на етапі проектування процесу та використовує, як інформацію по процесу – витрати потоків, масові долі і т. ін., так і дані за токсичністю, для обчислення впливу процесу на оточуюче середовище. Метод *WAR* базується на обчисленні потенціального впливу *PEI (Potential Environment Impact)* процесу на оточуюче середовище. На етапі розробки процесу виконується оцінювання *PEI*, в результаті якого обчислюється індекс впливу *I*, що виражає кількісний вимір екологічного впливу процесу. Мета методології скоріше мінімізувати *PEI*, а не загальну кількість відходів, утворених процесом. Метод базується на обчисленні звичайних матеріальних та теплових балансів.

Алгоритм *WAR* може бути інструментом для порівняння потенціальних впливів на оточуюче середовище різних проектних варіантів процесу. Чим нижче значення потенціального впливу, тим кращим буде варіант процесу для оточуючого середовища. Цей підхід потребує використання моделюючих програм-симуляторів. Моделюючі програми *Aspen*, *Hysys*, *Chemcad*, *PRO/II* та ін. стали стандартним засобом рішення різноманітних задач дослідження хіміко-технологічних процесів для інженерів, тому що досить легко та швидко дозволяють аналізувати варіанти процесу на відміну від тривалих та дорогих пілотних експериментів.

5.5.1. Методика проведення дослідження за алгоритмом *WAR*

В наш час мінімізація відходів технологічних процесів є однією із найважливіших задач, яку необхідно вирішувати при створенні будь-яких хіміко-технологічних виробництв. Складність задачі вимагає наявності ефективних процедур прийняття рішень для оцінювання розроблюваних варіантів технологічних схем процесу ще на стадії проектування, оскільки саме від обраного проектного варіанту залежить якість роботи хіміко-технологічної схеми (ХТС) на стадії експлуатації.

Традиційний підхід до мінімізації відходів потребує постановки відповідної задачі оптимізації, рішення якої дозволить знайти найкращу комбінацію технологічних умов процесу або оптимальну структуру ХТС. Взагалі строгий математичний підхід до пошуку оптимальних рішень для складних ХТС неприйнятний, оскільки нагальні задачі як правило багатокритеріальні, до того ж містять дискретні параметри й дуже складно піддаюся постановці та рішенню в класичному вигляді задач оптимізації.

Американською агенцією з охорони навколишнього середовища використовується інструмент дослідження ХТС WAR (*Waste Reduction Algorithm*). Алгоритм базується на концепції балансу навколишнього середовища подібно до матеріальних та енергетичних балансів. Для прийняття рішень по забезпеченню мінімізації відходів хіміко-технологічного процесу пропонується використати підхід, який базується на побудові моделі ХТС та подальшому її аналізу. Суттєвим моментом пропонованого підходу є те, що інформація для прийняття рішень в основному буде отримуватись на основі програмної реалізації моделі ХТС, що дозволить проводити розрахунки варіантів ХТС та їх оцінювання засобами сучасних програм-симуляторів, таких як Aspen, Hysys, Chemcad, PRO/II та COFE. Ці програми дозволяють не тільки розраховувати матеріальні й теплові баланси складних ХТС, але й проводити оцінку їх технологічної та економічної ефективності, а також за допомогою відповідних вбудованих засобів, таких як WAR, вирішувати проблему мінімізації відходів.

Розрахунок індексів впливу на навколишнє середовище

Застосування методології WAR передбачає можливість оцінювання потенційного впливу хімічних речовин на навколишнє середовище. Класифікація хімічних впливів на навколишнє середовище і їх нормалізовані значення були прийняті на підставі праць американських вчених. Запропоновано вісім різних категорій впливу:

1. Потенціал токсичності на людину при прийомі всередину (*HTPI*);
2. Потенціал токсичності на людину при вдиханні або попаданні на шкіру (*HTPE*);
3. Потенціал руйнування озонового шару (*ODP*);
4. Потенціал глобального потепління (*GWP*);
5. Потенціал фотохімічного окислення (*PCOP*);
6. Потенціал окислення (*AP*);
7. Потенціал водної токсичності (*ATP*);
8. Потенціал земної токсичності (*ITP*).

Рівняння збереження впливу має вигляд:

$$\frac{dI_{\text{sys}}}{dt} = I_{\text{in}} - I_{\text{out}} + I_{\text{gen}} \quad (5.1)$$

де I_{sys} виражає потенційний екологічний вплив в самому процесі, I_{in} показує ступінь потенційного впливу на вході, I_{out} показує ступінь потенційного впливу на виході, а також I_{gen} виражає потенційний вплив, утворений в системі, в результаті хімічних реакцій.

Варто звернути увагу, що процеси можуть також поглинати речовини, які створюють негативний вплив на навколишнє середовище, а отже і I_{gen} може, по суті, бути від'ємним. Для стаціонарних процесів, рівняння збереження зводиться до:

$$0 = I_{\text{in}} - I_{\text{out}} + I_{\text{gen}} \quad (5.2)$$

звідки випливає, що в системі не накопичується ніякого потенціального впливу на навколишнє середовище. Також варто зазначити, що рівняння (5.1) і (5.2) служать для визначення I_{gen} .

Застосування (5.1) або (5.2) для хімічних процесів, вимагає формули, яка б зв'язувала потенційний вплив на навколишнє середовище з вимірюваними величинами. Потенційні екологічні наслідки викликані енергетичними і матеріальними потоками, які входять в систему або виходять з неї, із навколишнього середовища. На перший погляд, цей підхід обмежується потенційним впливом, обумовленим лише матеріальними потоками, і не враховує впливи, пов'язані з енергією. Ефекти,

обумовлені виснаженням ресурсів також не розглядають, головним чином, через відсутність дієвої методики для їх вимірювання. Вираз (5.3) дозволяє кількісно оцінити потенціальний вплив на навколишнє середовище:

$$I_i = \sum_j \dot{I}_j^{(i)} = \sum_j \dot{M}_j^{(i)} \sum_k x_{kj} \psi_j + \dots \quad (5.3)$$

Де сума по j береться із вхідного або вихідного потоку i , сума по k береться з урахуванням всіх хімічних елементів реакції, I_i – швидкість потенційного впливу на навколишнє середовище для потоку j , який може бути вхідним або готовим продуктом, $M_j^{(i)}$ масова витрата потоку j , який може бути як вхідним, так і вихідним, x_{kj} – масова частка хімічного елементу k в потоці j , та ψ_j є загальний потенціал впливу на навколишнє середовище хімічних речовин j . Зауважимо, що рівняння (5.3) – це рівняння апроксимації, яке не включає спільних ефектів, які можуть виникнути, коли присутні кілька хімічних речовин.

Індекси впливу

Щоб визначити дві категорії індексів для екологічного впливу стаціонарного стану процесів хімічного виробництва, можна використовувати рівняння (5.1). Перша категорія індексів вимірює утворення потенційного впливу на оточуюче середовище в межах процесів, а друга – потенційний вплив на оточуюче середовище, викликаний самими процесами. Було розроблено досить велику кількість індексів в межах кожної категорії. Розглянемо лише шість з цих індексів, по три з кожної категорії, що є найбільш придатними та корисними для вирішення проблеми зменшення відходів.

Усі відходи розглядаються як забруднювачі, тому, потенційний вплив усіх продуктів на навколишнє середовище зводиться до 0, тобто $\psi_j=0$ для усіх продуктів j . Ці припущення сумісні з ціллю даної роботи, яка повинна представити методологію зменшення відходів, тобто першочергово це стосується зменшення негативного впливу та кількості «не-продуктів». Перший індекс першої категорії індексів, отриманий з рівняння (5.2) для I_{gen}^{NP} та додавання надрядкового індексу NP для «не-продуктів» дає:

$$I_{gen}^{NP} = I_{out}^{NP} - I_{in}^{NP} \quad (5.4)$$

де I_{out}^{NP} та I_{in}^{NP} - потенційні впливи на навколишнє середовище, що відносяться до не-продуктів, тобто забруднювачів на виході та на вході. Відповідно до рівняння (5.3) можна дати точне формулювання для I_{out}^{NP} та I_{in}^{NP} , де усі компоненти, продукти та не-продукти, включені в суму, але оскільки для усіх продуктів $\psi_j=0$, то із сумування продукти видаляються. Індекс, I_{gen}^{NP} , вимірює загальну швидкість, з якою процес здійснює потенційний вплив на навколишнє середовище через не-продукти (*non-products* – NP). Для I_{gen}^{NP} в якості одиниць вимірювання використовується потенційний вплив на навколишнє середовище, що створюється з часом.

Другий індекс \hat{I}_{gen}^{NP} з першої категорії отриманий діленням рівняння (5.4) на швидкість при якій процес виробляє продукти, дає питомий вплив:

$$\hat{I}_{gen}^{NP} = \frac{I_{gen}^{NP}}{\sum_p \dot{P}_p} = \frac{I_{out}^{NP} - I_{in}^{NP}}{\sum_p \dot{P}_p} \quad (5.5)$$

Де суми по p взяті за всіма продуктами p , і \dot{P}_p - масова витрата продукту p . \hat{I}_{gen}^{NP} визначає потенційний вплив, який створюється всіма відходами виробництва масової

одиниці продуктів p . Індекс \hat{I}_{gen}^{NP} має розмірність: потенційний вплив на навколишнє середовище на одиницю маси продукту. Третій індекс першої категорії, \hat{M}_{gen}^{NP} виходить з рівняння (5.5), шляхом прирівнювання потенціалу навколишнього впливу (ψ_j) усіх продуктів, до нуля, і відповідних їм відходів до одиниці. Це має ефект присвоєння того ж потенціалу впливу на навколишнє середовище для всіх відходів. Індекс \hat{M}_{gen}^{NP} є мірою масової неефективності процесу, тобто він показує відношення переробленої сировини в небажану форму до переробленої сировини в бажану форму. Рівняння для \hat{M}_{gen}^{NP} буде наступним:

$$\hat{M}_{gen}^{NP} = \frac{\sum_j \dot{M}_j^{(out)} \sum_k x_{kj}^{NP} - \sum_j \dot{M}_j^{in} \sum_k x_{kj}^{NP}}{\sum_p \dot{P}_p} \quad (5.6)$$

де сума по $\dot{M}_j^{(out)}$ береться тільки по вихідним потокам, сума по \dot{M}_j^{in} береться тільки по вхідним потокам, а сума по x_{kj}^{NP} береться тільки по всім відходам k в потоці j . Одиницею вимірювання \hat{M}_{gen}^{NP} є маса відходів до маси продуктів.

Перший індекс другої категорії показників (вплив викидів) \hat{I}_{out}^{NP} є просто загальним коефіцієнтом потенційного екологічного впливу вихідних речовин. \hat{I}_{out}^{NP} розраховується за формулою (5.3) за умови що $\psi_j = 0$ для всіх продуктів j . Індекс, \hat{I}_{out}^{NP} є мірою швидкості, з якою процес виділяє потенційний вплив на навколишнє середовище; одиницею вимірювання є одиниця потенціального впливу за одиницю часу.

Другий індекс другої категорії, \hat{I}_{out}^{NP} , отримується шляхом розділення швидкості потенційного екологічного впливу від відходів та швидкості отримання продукту:

$$\hat{I}_{out}^{NP} = \frac{\dot{I}_{out}^{NP}}{\sum_p \dot{P}_p} \quad (5.7)$$

Індекс \hat{I}_{out}^{NP} має розмірність: одиниця потенційного впливу на навколишнє середовище до маси продукту. Цей вираз дає індекс забруднення, який вимірює потенціал впливу на навколишнє середовище, що має місце при виробництві одиниці маси продуктів.

Третій індекс другої категорії \hat{M}_{out}^{NP} виходить з рівняння (5.7), шляхом встановлення потенційного впливу на навколишнє середовище (ψ_j) всієї продукції до нуля і всіх відходів до одиниці. Отримуємо наступний вираз:

$$\hat{M}_{out}^{NP} = \frac{\sum_j \dot{M}_j^{(out)} \sum_k x_{kj}^{NP}}{\sum_p \dot{P}_p} \quad (5.8)$$

який пов'язаний з індексом забруднення ϕ_n наступним чином:

$$\widehat{M}_{out}^{NP} = \sum_n \phi_n \quad (5.9)$$

де сума обчислюється з урахуванням всієї продукції n . \widehat{M}_{out}^{NP} вимірює кількість не пов'язаних з масою продукції або забруднюючої речовини, що випускаються при виробництві одиниці маси продукту, і має наступну одиницю вимірювання: маса відходів на масу продукту. Крім того, він також являється показником масової неефективності.

Обчислення відносного впливу

При застосуванні методології WAR до хімічних процесів, для обчислення відносного впливу ψ_j було запропоновано наступний вираз:

$$\psi_j = \sum_l \alpha_l \psi_{j,l}^s \quad (5.10)$$

Сума береться по категоріям потенційних хімічних впливів на навколишнє середовище, наприклад, потенціал руйнування озону, здоров'я людини і т. д. Де α_l є відносним ваговим коефіцієнтом для впливу типу l , незалежного від хімічних речовин j , а $\psi_{j,l}^s$ є конкретним потенційним впливом на навколишнє середовище хімічних речовин j для впливу типу l . Розмірність α_l – одиниця потенційного впливу на навколишнє середовище на одиницю масу.

Відносний ваговий коефіцієнт α_l дозволяє налаштовувати вираз (5.10) під специфічні або локальні умови. Можна спочатку встановити всі α_l як єдине значення, скажімо, одиниця, і дозволити користувачам змінювати окремі α_l від 0 до 10 відповідно до місцевих потреб і локальної політики. Необхідно звернути увагу, що для відносного порівняння, абсолютна величина не є важливою. Наприклад, фотохімічний потенціал окислення буде мати більшу вагу, ніж інші індекси в області, яка потерпає від смогу. Існує можливість розробити більш досконалі методи визначення α_l .

5.5.2. Використання методики на прикладі виробництва метил етил кетону з вторинного бутилового спирту

Використання алгоритму WAR розглянемо на прикладі виробництва метил етил кетону (МЕК) з вторинного бутилового спирту (SBA). Дане дослідження виконано для типової схеми хімічного виробництва, що включає декілька апаратів: реактор, в якому відбувається дегідрування вторинного бутилового спирту, сепаратор, змішувачі та теплообмінники. Виходячи з великої кількості апаратів та хімічних перетворень, які відбуваються під час виробничого процесу, досить важко оцінити всі варіанти схеми на основі WAR алгоритму.

Базову схему процесу виробництва метил етил кетону з вторинного бутилового спирту показано на рис. 5.32.

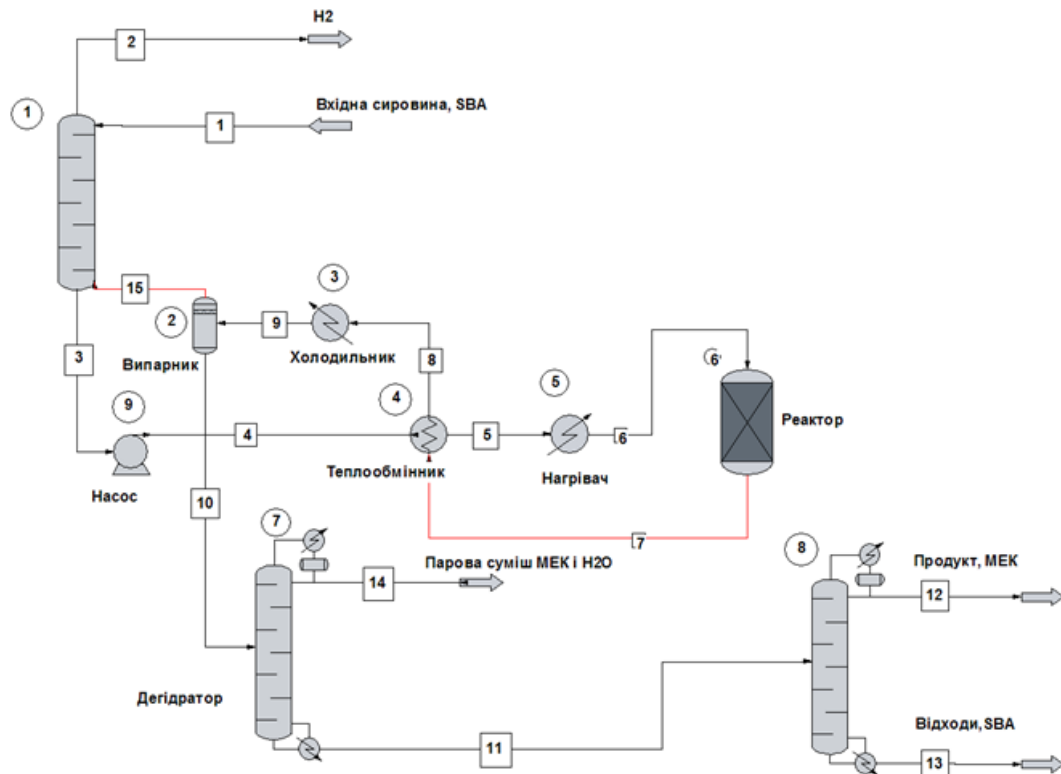


Рис. 5.32. Базовий варіант схеми процесу виробництва метилетилкетону (МЕК) з вторинного бутилового спирту (SBA)

Бутиловий спирт подається в скруббер, де він забирає надлишковий метил етил кетон з потоку гідрогену. Після цього в потоці вторинного бутилового спирту за допомогою насосу встановлюють робочий тиск та за допомогою теплообмінників – робочу температуру. Нагрітий вторинний бутиловий спирт подається в реактор, де відбуваються хімічні перетворення. Вихідна суміш із реактора подається в теплообмінник, де вона частково конденсується. Суміш *МЕК*, гідрогену та непрореагованого бутилового спирту в подальшому охолоджуються та поступають в сепаратор, де гідроген випаровується шляхом пониження тиску. Після чого видаляють гідроген та в ректифікаційну колону подається рідка фаза.

Розглянута схема процесу була змодельована за допомогою програми Chemcad 6.3. В результаті розрахунків базового варіанту схеми були отримані масові склади всіх потоків. Склади вхідних та вихідних потоків наведені в таблиці 5.1.

Таблиця 5.1

Масовий склад вхідних/вихідних потоків у базовій схемі процесу виробництва *МЕК* з вторинного бутилового спирту

Потік (склад кг/год)	№1	№2	№12	№13	№14
<i>SBA</i>	3362	15	3	2672	1
<i>МЕК</i>	0	0	567	13	71
H ₂ O	8	0	0	0	7
H ₂	0	18	0	0	0

Оцінка базової схеми показала, що в потоці під номером 13 міститься велика кількість непрореагованого вторинного бутилового спирту та мала кількість *МЕК*. Тому слід зауважити, що схема потребує деякої модернізації.

Модифікована схема

Для початку застосування методики по мінімізації відходів, логічно було б спробувати відновити вторинний бутиловий спирт та *МЕК*. Саме тому, ХТС процесу необхідно змінити шляхом введення рециклу потоку 13. На даному етапі розглядалися два випадки: ступінь повторного використання 50% або 100% потоку №13. Повторне використання потоку №13 (100%) спричинила б перекриття потоку №18. Але це абсолютно немає сенсу з огляду на те, що потік №18 містить лише рідкі домішки, які необхідно вивести із системи. Без цього очищення, рідкі домішки будуть накопичуватися всередині системи і з часом повністю паралізують її роботу. На рис. 5.33 показана модифікована схема процесу з 50% ступенем повторного використання. Масові потоки та склад деяких вхідних та вихідних потоків для модифікованої ХТС з 50% повторного використання наведені в таблиці 5.2.

Таблиця 5.2

Масовий склад вхідних/вихідних потоків у модифікованій схемі (з 50% повторного використання) виробництва *MEK* з вторинного бутилового спирту

Потік (склад кг/год)	№1	№2	№12	№13	№14
<i>SBA</i>	3362	168	5	1	2124
<i>MEK</i>	0	1	980	64	10
H ₂ O	8	2	0	6	0
H ₂	0	29	0	0	0

Модифікація процесу призвела до збільшення кількості виходу продукту приблизно на 73%, та зменшення кількості відходів вторинного бутилового спирту в потоці №18 на 20%.

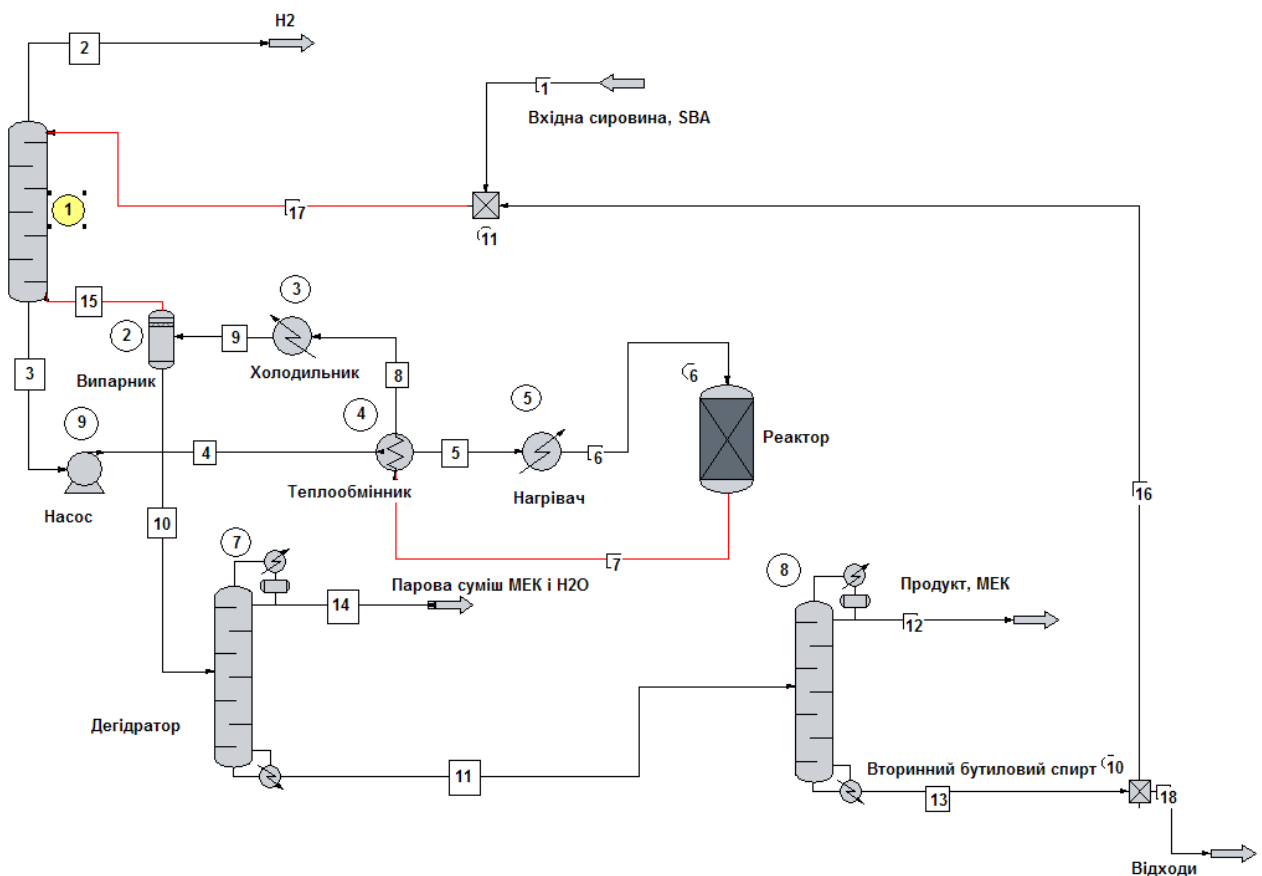


Рис. 5.33. Модифікована схема процесу виробництва метил етил кетону (*MEK*) з вторинного бутилового спирту (*SBA*) з 50% ступенем повторного використання

Аналіз таблиць 5.1–5.3 показав, що загальна кількість відходів зменшилась, а тому й зменшився вплив на навколишнє середовище. Однак, цієї інформації про загальні кількості відходів недостатньо для того, щоб зробити кількісне порівняння впливів кожного із варіантів технологічної схеми на навколишнє середовище. Для цього порівняння необхідно розрахувати індекси впливу хімічних речовин на навколишнє середовище.

Для модифікованої ХТС зі 100% ступенем повторного використання (схема представлена на рис. 5.34), масові потоки та склади вхідних/вихідних потоків наведені в таблиці 5.3. Необхідно зазначити, що збільшення ступеня повторного використання збільшує кількість продукту на виході на 269%, паралельно зменшуючи кількість відходів вторинного бутилового спирту в потоці №13 до 0.

Таблиця 5.3

Масові потоки речовин та склад вхідних/вихідних потоків у модифікованій схемі (з 50% повторного використання) процесу виробництва *МЕК* з вторинного бутилового спирту

Потік (склад кг/год)	№1	№2	№12	№14
<i>SBA</i>	3362	117	11	1
<i>МЕК</i>	0	11	2094	59
H ₂ O	8	3	0	5
H ₂	0	60	0	0

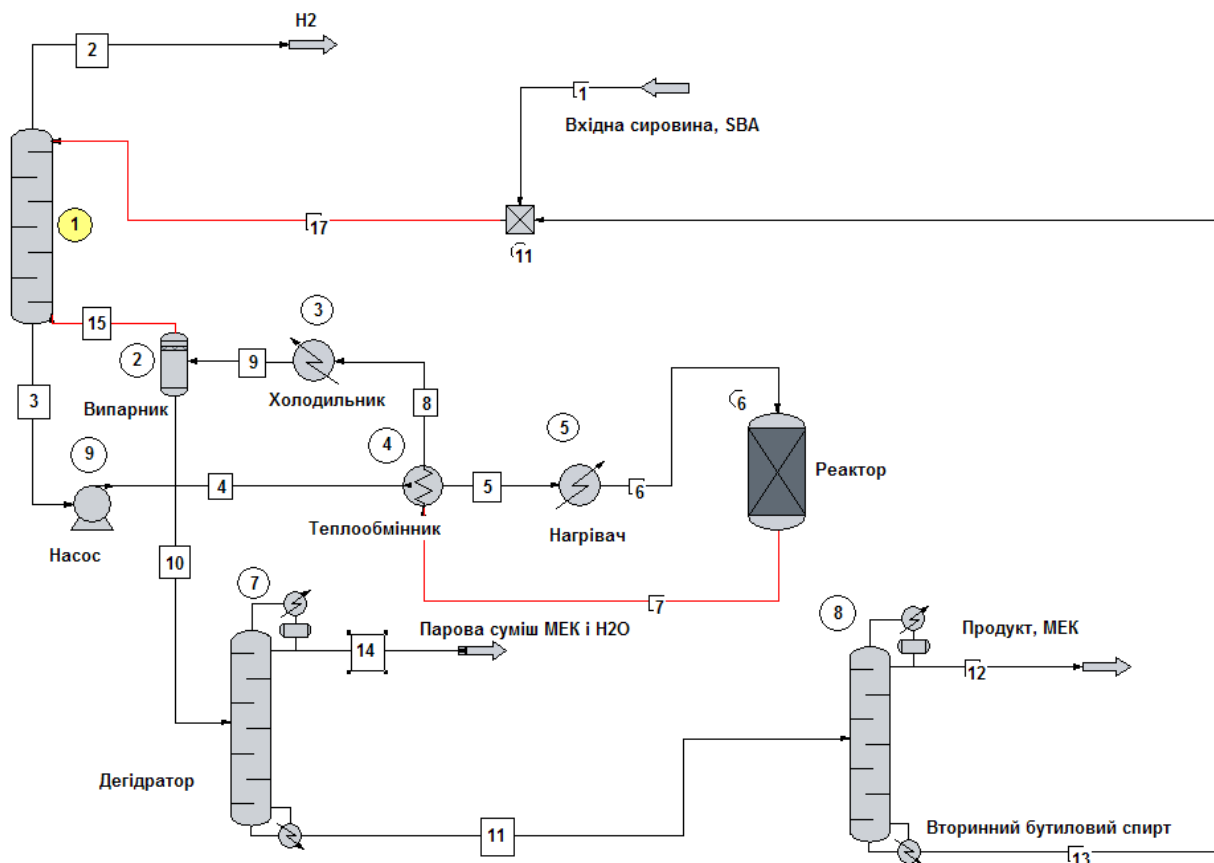


Рис. 5.34. Модифікована схема процесу виробництва метилетилкетону (*МЕК*) з вторинного бутилового спирту (*SBA*) зі 100% ступенем повторного використання

Розрахунок індексів впливу на навколишнє середовище

Для кожного варіанту схеми (один базовий і два модифікованих) було розраховано шість різних індексів впливу на навколишнє середовище. Індекси були отримані за допомогою програмного засобу Chemcad 6.3 з інтегрованою програмою WAR на базі формул 5.3–5.8, масових потоків, наведених в таблицях 5.1–5.3, рівняння (5.10) та нормалізованих оцінок хімічного впливу всіх речовин процесу на навколишнє середовище, наведених в таблиці 5.4.

Таблиця 5.4

Нормалізовані показники хімічного впливу

H ₂	MEK	SBA	H ₂ O	N ₂	Ar	CH ₄	NH ₃
0	0,42	4,1x10 ⁻⁴	0	0	0	7,4 x10 ⁻⁴	0,93

На рис. 5.35–5.37 наведено послідовність дій для розрахунку індексів в середовищі Chemcad 6.3.1. Відносні вагові фактори α були прийняті рівними 1.

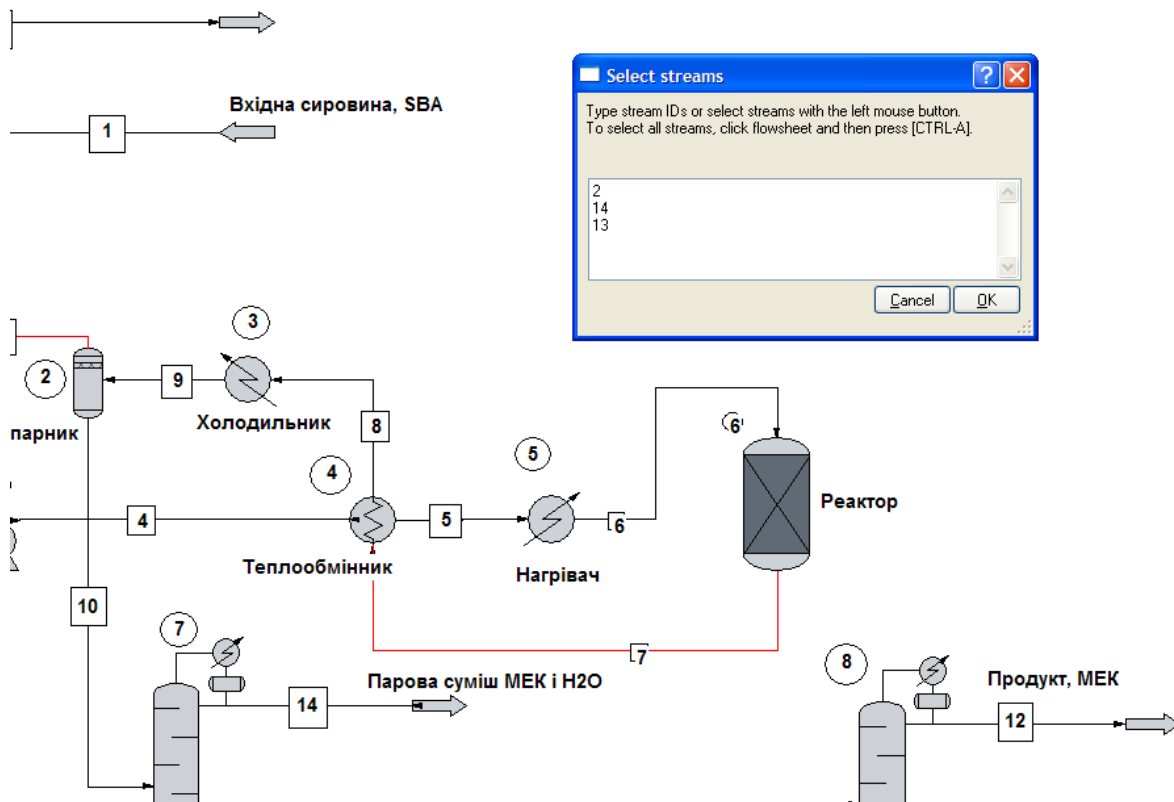


Рис. 5.35. Вибір необхідних потоків, які містять забруднюючі речовини

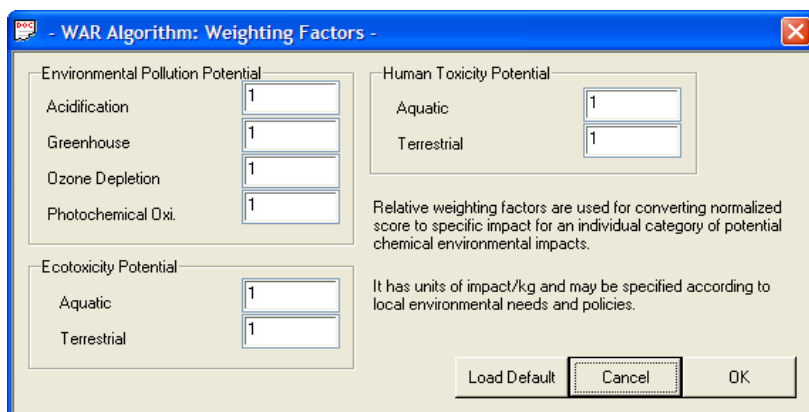


Рис. 5.36. Введення вагових факторів

Raw Component Factors				
ID Component Name	Ozone Depletion	Global Warming	Smog Formation	Acid Rain
450 Sec-Butanol	0	0	0	0
153 MEK	0	0	0.473	0
62 Water	0	0	0	0
1 Hydrogen	0	0	0	0

Raw Component Factors				
ID Component Name	<- Human Toxicity --> OSHA PEL	<- EcoToxicity ---> LD50	<- EcoToxicity ---> LC50	<- EcoToxicity ---> LD50
450 Sec-Butanol	450	6480	3670	6480
153 MEK	590	2737	3220	2737
62 Water	0	0	0	0
1 Hydrogen	0	0	0	0

Normalized Impact Scores				
ID Component Name	Ozone Depletion	Global Warming	Smog Formation	Acid Rain
450 Sec-Butanol	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000
153 MEK	0.00e+000	0.00e+000	9.72e-001	0.00e+000
62 Water	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000
1 Hydrogen	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000

Normalized Impact Scores				
ID Component Name	<- Human Toxicity --> OSHA PEL	<- EcoToxicity ---> LD50	<- EcoToxicity ---> LC50	<- EcoToxicity ---> LD50
450 Sec-Butanol	6.48e-004	5.60e-002	5.91e-004	5.60e-002
153 MEK	4.94e-004	1.32e-001	6.73e-004	1.32e-001
62 Water	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000
1 Hydrogen	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000

Relative Weighting Factor	
Impact Category	Value (imp/kg)

Рис. 5.37. Вікно результатів

В таблиці 5.5 наведено основні розраховані індекси впливу на навколишнє середовище.

Таблиця 5.5

Основні розраховані індекси впливу на навколишнє середовище

	\hat{I}_{gen}^{NP} , вкл/кг $\times 10$	I_{out}^{NP} , вкл/ГОД $\times 1000$	\hat{I}_{out}^{NP} , вкл/кг $\times 100$	\hat{M}_{out}^{NP} , кг/кг $\times 100$
Модифікована 100%	115,00	214,00	102,00	60,70
Модифікована 50%	120,00	353,00	367,00	250,00
Базова схема	128,00	409,00	718,00	491,00

\hat{I}_{gen}^{NP} – Утворення питомого потенційного впливу на навколишнє середовище із відходів виробництва, вкл/кг.

I_{out}^{NP} – Швидкість утворення потенційного впливу на навколишнє середовище із-за відходів виробництва, вкл/год

\hat{I}_{out}^{NP} – Викид питомого потенційного впливу на навколишнє середовище із-за відходів виробництва, вкл/кг

\hat{M}_{out}^{NP} – Маса відходів від виробництва, кг відходів / кг продукту

Індекс \hat{I}_{gen}^{NP} відноситься до першої категорії індексів, тобто індексів впливу, які створюються під час процесу.

Індекси I_{out}^{NP} , \hat{I}_{out}^{NP} та \hat{M}_{out}^{NP} відносяться до другої категорії індексів, тобто індексів впливу, які формуються на виході із системи. Для можливості відображення всіх індексів впливу на одній діаграмі виконано їх масштабування, а саме: індекс \hat{I}_{out}^{NP} помножений на ваговий коефіцієнт 100, індекс \hat{M}_{out}^{NP} - на 100, а індекс I_{out}^{NP} - на 1000. Специфічний індекс \hat{I}_{gen}^{NP} був помножений на ваговий коефіцієнт 10, і також може бути показаний на діаграмі оціночних індексів.

Таким чином, основні результати оцінювання впливів можуть бути представлено у вигляді діаграм (рис. 5.38).

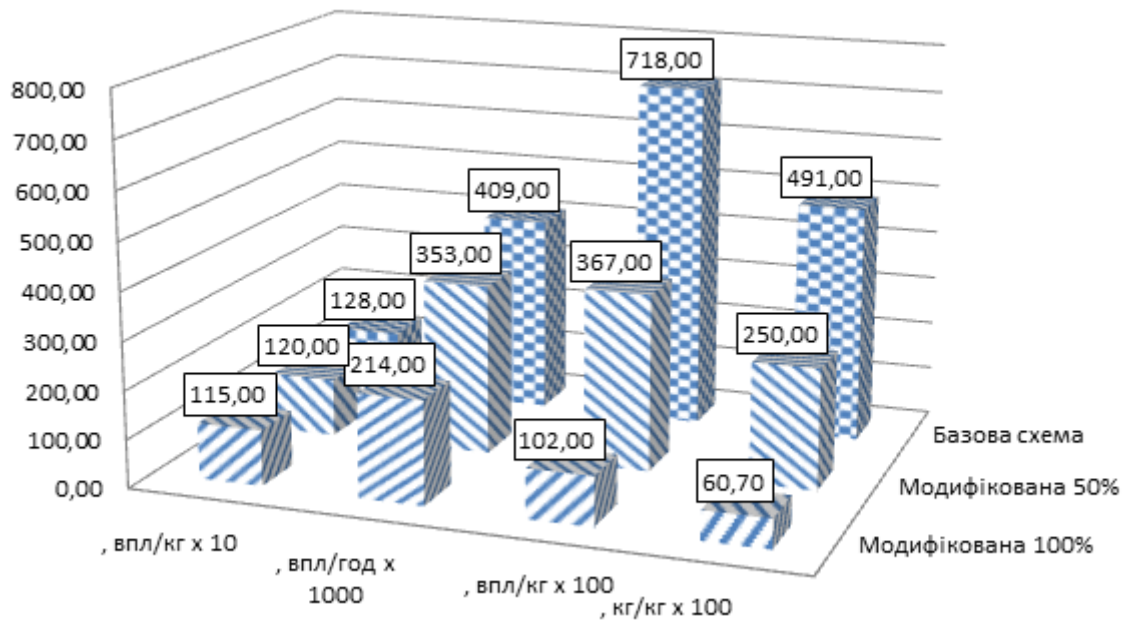


Рис. 5.38. Індеси впливу, який утворюється під час виробництва метил етил кетону (МЕК) з вторинного бутилового спирту (SBA)

Додаткова інформація з теорії потенційного впливу та перелік основних комп'ютерних засобів для його оцінювання надано в Додатку Г.

Аналіз результатів оцінювання варіантів схем отримання МЕК за індексами впливу

Індекс впливу, який створюється під час процесу (рис. 5.38) показує, що швидкість утворення впливу відходами зменшилась на 13% для 50% повторного використання, та на 20% для 100% повторного використання.

Індекси впливу, які формуються на виході із системи показують, що:

- 1) Швидкість утворення впливу відходами знизилась на 11% для 50% повторного використання, та на 17% для 100% повторного використання.
- 2) Вплив, який створюють відходи на кілограм продукту знизився на 48% для 50% повторного використання, та на 78% для 100% повторного використання.
- 3) Вихід кілограму відходів на кілограм продукту знизився на 60% для 50% повторного використання, та на 88% для 100% повторного використання.

Варто зазначити, що зниження рівня шкідливих викидів має місце за всіма індексами. Найбільш важливим індексом в даному випадку являється кількість шкідливих викидів на кілограм продукту. Зменшення цього індексу пов'язане зі зменшенням індексу утворення шкідливого впливу в масовому еквіваленті. Це зменшення також є віддзеркаленням збільшення продуктивності заводу в цілому.

Зменшення індексів є достатньо великим, дивлячись на те, що вони представляють значне зменшення рівня забруднення. Послідовність зменшення утворення впливу на навколишнє середовище на одиницю маси продукту (48-77%) та вихід впливу на навколишнє середовище на масу продукту (48-78%), означає, що модифікована схема виробництва може задовольнити більш широкі потреби ринку, не збільшуючи масштаби виробництва, і, відповідно, кількість шкідливих викидів у навколишнє середовище. Це також означає, що модифікована схема, що є на 48-78% менше базового варіанту, може задовольнити потреби одного і того ж ринку, для якого була розроблена базова схема.

Таким чином, подібний підхід можна реалізувати в процесі дослідження будь-якої технологічної схеми. Тобто, можна здійснити комп'ютерне моделювання різних її варіантів у моделюючій програмі, наприклад Chemcad. При цьому проводити розрахунки балансів для різних вхідних даних та керуючих параметрів, а також застосовуючи вбудовані в програму процедури аналізу можливих варіантів схеми. Треба знайти варіант схеми із мінімальним впливом на оточуюче середовище, для чого застосовати алгоритм мінімізації відходів WAR, який досить легко використати після розрахунку матеріальних балансів в Chemcad. Алгоритм WAR дозволяє отримати відносні значення впливів (рівня шкідливості) різних варіантів технологічних схем. Далі за критерієм зменшення впливів, які пов'язані із мінімізацією відходів, можна обрати найкращий варіант ХТС виробництва. Враховуючи сучасні виклики сталого розвитку, можна зробити висновок, що застосування алгоритму WAR разом із моделюючою програмою надає можливість оцінити й порівняти рівень сталості кожного із пропонувананих проектних варіантів технологічної схеми, після чого стає можливим обрати найкращий або «еко-ефективний».

Застосування програми Chemcad та вбудованого в цю програму алгоритму WAR продемонстровано на прикладах в Додатку В.

5.6. Запитання та завдання для самоперевірки

1. Які ви знаєте сучасні моделюючі пакети, що застосовуються для розрахунку ХТС?
2. Назвіть основні складові універсальних моделюючих програм-симуляторів.
3. Покажіть, як проводиться розрахунок ХТС в програмі Chemcad.
4. Навести основні складові палітри Chemcad для моделювання ХТС.
5. Основні пункти головного меню, які функції вони виконують?
6. Які основні кроки при моделюванні ХТС у Chemcad ?
7. Як визначити речовини у потоках технологічної схеми?
8. Як можна задати специфікації апаратів схеми?
9. Які режими функціонування схеми можна досліджувати за допомогою Chemcad?
10. Особливості розрахунку схем із рециклами у Chemcad?
11. Які можливості розрахунку та дослідження реалізовано через пункт меню Run?
12. Особливості програмного пакету Aspen Plus?
13. Які задачі можуть вирішуватись за допомогою програми Hysys?
14. Розкажіть про можливості програмного пакету PRO/II.
15. Яку задачу можна вирішити за допомогою алгоритму WAR?
16. Які впливи враховує алгоритм WAR?

Розділ 6. Метод статистичних випробувань для врахування випадковостей при моделюванні та аналізі складних систем

Користь і бажаність побудови аналітичних моделей (хоча б наближених) сумніву не підлягають. У випадках, коли аналітичні методи не можна побудувати (або ж потрібно перевірити їхню точність), доводиться прибігати до універсального методу статистичного моделювання або, як його часто називають, методу Монте-Карло.

Ідея методу надзвичайно проста й полягає в наступному. Замість того, щоб описувати процес за допомогою аналітичного апарата (диференціальних або алгебраїчних рівнянь), виконується «розіграш» випадкового явища за допомогою спеціально організованої процедури, що включає в себе випадковість і дає випадковий результат. У результаті статистичного моделювання («розіграшу») ми одержуємо щоразу нову, відмінну від інших реалізацію досліджуваного процесу. Якщо таких реалізацій отримано багато, то ця множина реалізацій може бути використана як статистичний матеріал, що може бути оброблений звичайними методами математичної статистики. Після такої обробки можуть бути отримані характеристики, що цікавлять нас: математичне очікування та дисперсії випадкових величин і т. ін.

6.1. Одиничний жереб і форми його організації

Основним елементом, з яких складається статистична модель, є одна випадкова реалізація моделюемого явища. Реалізація - це як би один «екземпляр» випадкового явища з усіма властивими йому випадками.

Щораз, коли в хід явища втручається випадок, його вплив ураховується не розрахунком, а жеребом.

Як можна здійснити цей жереб? Якщо жереб кидається для того, щоб довідатися, чи відбулася подія A , його потрібно організувати так, щоб умовний результат розіграшу мав ту ж імовірність, що й подія A .

Умовимося називати «одиничним жеребом» будь-який досвід з випадковим результатом, що відповідає на одне з наступних питань:

- 1) Відбулася чи ні подія A ?
- 2) Яка з подій A_1, A_2, \dots, A_k відбулася?
- 3) Яке значення прийняла випадкова величина X ?
- 4) Яку сукупність значень прийняла система випадкових величин X_1, X_2, \dots, X_k ?

Одиничний жереб може бути розіграний різними способами, але є один стандартний механізм, за допомогою якого можна здійснити будь-який різновид жереба. А саме, кожного разу досить уміти одержувати випадкове число R , всі значення якого від 0 до 1 рівно імовірні.

Розглянемо третю задачу, як основну, тому що четверта вирішується аналогічно стільки разів, скільки маємо випадкових величин X_1, X_2, \dots, X_k .

3) Яке значення прийняла випадкова величина X ? Коли випадкова величина безперервна й має задану щільність імовірності $f(x)$. Щоб розіграти її значення, досить здійснити наступну процедуру: перейти від щільності ймовірності $f(x)$ до функції розподілу $F(x)$ по формулі (6.1), а потім знайти для функції F зворотну їй функцію (6.2).

$$F(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)dx \quad (6.1)$$

Далі виконуємо таку послідовність дій:

- Розіграємо випадкове число R від 0 до 1.
- Відкладаємо його значення на осі OY (тобто як значення $F(x)$).
- Проводимо з отриманої точки лінію паралельну осі OX до перетину із графіком функції $F(x)$.
- З точки перетину опускаємо перпендикуляр на ось OX .
- Отриману точку X слід розглядати як значення зворотної функції Ψ .

Графічно процедура розіграшу значення X показана на рис.6.1. Для числа R знайдено таке значення X , при якому $F(X) = R$ (це показано стрілками на рис.6.1).

Можна записати, що отримане X є результатом підстановки R в зворотну функцію:

$$X = \Psi(R) \quad (6.2)$$

Можна довести, що отримане значення X має саме потрібний нам розподіл $f(x)$.

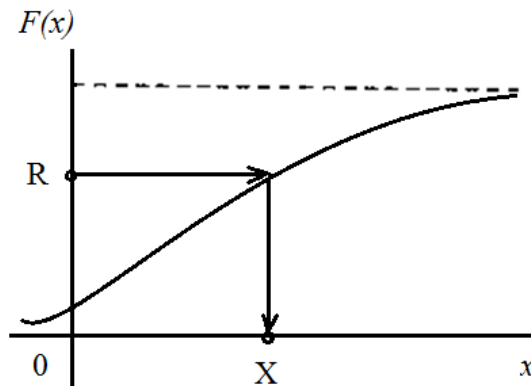


Рис.6.1 Функція розподілу $F(X)$

Далі розглянемо другу задачу. Оскільки перша є її спрощеним випадком $k=2$.

2) Яка з декількох подій відбулася? Нехай події A_1, A_2, \dots, A_k сумісні й утворюють повну групу. Тоді сума їхніх імовірностей p_1, p_2, \dots, p_k дорівнює одиниці. Розділимо інтервал $(0-1)$ на k ділянок довжиною p_1, p_2, \dots, p_k (рис. 6.2). На який з відрізків потрапило число R – та подія і відбулася.

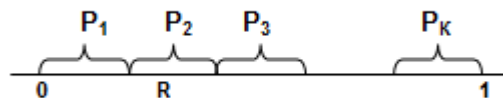


Рис.6.2. Розіграш, яка з подій відбулась

6.2. Засоби розіграшу випадкових чисел

Виникає питання: а як же розігрується це число R ?

Існує цілий ряд різновидів так званих «датчиків випадкових чисел»:

- Обертний барабан, у якому перемішуються перенумеровані кульки. Нехай, наприклад, нам треба розіграти випадкове число H від 0 до 1 з точністю до 0,001. Заклав у барабан 1000 перенумерованих кульок, приведемо його в обертання й після зупинки виберемо першу кульку, що попалася, прочитаємо його номер і розділимо на 1000.
- Скласти досить велику таблицю, у якій всі цифри 0, 1, 2, ..., 9 зустрічаються випадковим образом і з однаковою імовірністю (частотою) – таблиці випадкових чисел.
- Для розіграшу R на ЕОМ застосовуються спеціальні датчики, якими оснащені багато обчислювальних машин. Це можуть бути як «фізичні датчики», засновані на перетворенні випадкових шумів, так й обчислювальні алгоритми, по яких сама машина обчислює так звані «псевдовипадкові числа».

6.3. Імітаційна модель

Імітаційна модель (ІМ) – це формальний (тобто виконаний на деякій формальній мові) опис логіки функціонування досліджуваної системи і взаємодії окремих її елементів у часі, що враховує найбільш значущі причинно-наслідкові зв'язки у системі, і забезпечує проведення статистичних експериментів.

Оскільки основою імітаційного моделювання є метод статистичних випробувань, найбільший ефект від його застосування досягається при дослідженні систем, на функціонування яких найбільший вплив мають випадкові фактори.

Саме імітаційна модель може бути використана для комп'ютерного експерименту в цілях дослідження, проектування, аналізу і оцінки функціонування складних еколого-економічних систем.

Застосування імітаційного моделювання доцільне також у наступних випадках:

- якщо не існує закінченої постановки задачі на дослідження, і йде процес пізнання об'єкта моделювання;
- якщо характер процесів що протікають у системі не дозволяє описати ці процеси у аналітичній формі;
- якщо необхідно спостерігати за поведінкою системи (чи окремих її компонентів) протягом визначеного періоду, у тому числі зі зміною швидкості протікання процесів;
- при вивченні нових ситуацій у системі або при оцінці її функціонування у нових умовах;
- якщо досліджувана система є елементом більш складної системи, інші елементи якої мають реальне втілення;
- коли необхідно дослідити поведінку системи при введенні до неї нових компонентів;
- при підготовці спеціалістів і освоєнні нової техніки (у якості тренажерів).

Імітаційні моделі мають цілий ряд *недоліків*:

- 1) Перший і досить значний у тому, що розробка ІМ, як правило, вимагає великих витрат часу і сил.

- 2) Крім того, будь-яка імітаційна модель складної системи значно менш "об'єктивна", ніж аналітична модель, оскільки вона насамперед відтворює суб'єктивні уявлення розробника про систему що моделюється. Причому буває досить складно як спростувати, так і обґрунтувати адекватність створеної ІМ, особливо якщо мова іде про систему що проектується.
- 3) І ще, результати імітаційного моделювання, як і при будь-якому чисельному методі, завжди носять частковий характер.
- 4) Для отримання обґрунтованих висновків необхідне проведення серії модельних експериментів, а обробка результатів вимагає застосування спеціальних статистичних процедур.
- 5) "Об'єктивність" створюваної моделі може бути забезпечена к тому випадку, коли розробник ясно уявляє собі, які саме характеристики досліджуваної системи його цікавлять.

Для кожного варіанту постановки задачі дослідження можна обрати відповідну схему побудови моделі. У цьому відношенні знання існуючих схем побудови імітаційних моделей є досить корисним.

6.4. Застосування методу Монте-Карло

Метод Монте-Карло широко застосовується для:

- Визначення площі довільних фігур (або інтегралів).
- Вибору найкращих стратегій в задачах, де присутні багато випадкових факторів.
- Визначення імовірності, чи відбудеться якась подія.
- Моделювання поведінки складних еколого-економічних систем.

Саме останні системи є основним об'єктом дослідження в системному аналізі.

6.5. Запитання та завдання для самоперевірки

1. Як організувати одиничний жереб для того, щоб довідатися, чи відбулася подія А із заданою імовірністю?
2. Як має бути реалізовано розіграш для визначення яка саме подія має відбутися із послідовності подій, імовірності яких відомі?
3. Покажіть, як можна розіграти випадкову величину, що задана деякою функцією розподілу.
4. Що таке псевдовипадкові числа та як їх можна отримати?
5. Наведіть приклади застосування методу Монте-Карло.
6. Що таке імітаційна модель та як вона пов'язана із методом Монте-Карло?

Розділ 7. Мережі Петрі для рішення системних задач із дискретними процесами

7.1. Моделювання паралельних процесів за допомогою мережевих моделей

Майже будь-яка більш чи менш складна система має у своєму складі компоненти, що працюють одночасно або, як прийнято казати в технічних науках, паралельно.

Отже, якщо в складі системи є компоненти (підсистеми), що виконують свої функції одночасно, то можна стверджувати, що в такій системі існують паралельні процеси. Паралельно працюючі підсистеми можуть взаємодіяти дуже різним чином або взагалі працювати в незалежності одна від одної. Спосіб взаємодії підсистем визначає вид паралельних процесів, що протікають у системі. В свою чергу, вид процесів, що моделюють, впливає на вибір метода їх імітації.

Види паралельних процесів:

Асинхронний паралельний процес – такий процес, стан якого не залежить від стану іншого паралельного процесу (ПП).

Приклад асинхронних ПП, що протікають в рамках однієї системи: підготовка та проведення рекламної компанії фірмою та робота складального конвеєра. Інший приклад з області обчислювальної техніки: виконання обчислень процесором і виведення інформації на друк.

Синхронний ПП – такий процес, стан якого залежить від стану взаємодіючих з ним ПП.

Приклад синхронного ПП: робота торговельної організації і безкоштовна доставка товару зі складу (нема товару – нема торгівлі).

Один і той самий процес може бути синхронним по відношенню до одного з активних ПП і асинхронним по відношенню до іншого. Так, при роботі обчислювальної мережі за технологією «клієнт-сервер» кожний з вузлів мережі синхронізує свою роботу з роботою сервера, але не залежить від роботи інших вузлів.

Підлеглий ПП – створюється та керується іншим процесом (більш високого рівня).

Досить характерним прикладом таких процесів є ведення бойових дій підлеглими підрозділами.

Незалежний ПП – процес, який не є підлеглим ні для одного з процесів.

Припустимо, після запуску некерованої зенітної ракети її політ можна розглядати як незалежний процес, одночасно з яким літак веде бойові дії іншими засобами.

Спосіб організації паралельних процесів в системі залежить від фізичної суті цієї системи.

На прикладному рівні взаємодія між ПП реалізується програмістом засобами мови, на якій розроблюється програмне забезпечення. Найбільшими можливостями в цьому відношенні володіють, так звані, мови реального часу (МРЧ) та мови моделювання.

Мови реального часу – це мови, призначені для створення програмного забезпечення, працюючого в реальному масштабі часу, наприклад, для розробки різних автоматизованих систем управління. До них, зокрема, відносяться: мова Ада, мова Модула. Зрозуміло, що використання будь-яких мов потребує зусиль програмістів.

В протилежність до мов програмування існує підхід на базі мереж, з яких найбільш елегантними і досить поширеними для опису паралельних процесів є мережі Петрі. Ми обмежимося викладенням лише тих основних відомостей, які необхідні з точки зору реалізації технології імітаційного моделювання паралельних процесів.

7.2. Моделювання та аналіз дискретних процесів за допомогою мереж Петрі

Серед багатьох існуючих методів опису й аналізу дискретних паралельних систем виділився підхід, що заснований на використанні мережних моделей спеціального виду мережі Петрі.

У теорії мереж Петрі склалися три основних напрямки досліджень:

- 1) загальна теорія мереж, що виділяє і формалізує базові поняття, вивчає зв'язок між різними класами мереж і класами реальних систем;
- 2) спеціальна теорія мереж, що вивчає власне мережі Петрі, як математичні об'єкти;
- 3) застосування мереж Петрі до конкретних задач аналізу і синтезу дискретних систем.

Можливо кілька шляхів практичного застосування мереж Петрі при проектуванні й аналізі систем. У першому підході мереж Петрі розглядаються як допоміжний інструмент аналізу. Тут для побудови системи використовуються загальноприйняті методи проектування. Потім побудована система моделюється мережею Петрі, і модель аналізується. виправляються недоліки (проект модифікується) і знову моделюється та аналізується і т. д. Цей підхід найчастіше застосовують до існуючих систем, але він вимагає постійного перетворення проекрованої системи в модель у виді мереж Петрі.

Інший, більш радикальний підхід, полягає в тому, що весь процес проектування і визначення характеристик проводиться в термінах мереж Петрі. Методи аналізу застосовуються тільки для створення проекту мереж Петрі, тут задача полягає в перетворенні представлення мережі Петрі в реальну робочу систему.

Ці два підходи використання мережі Петрі в процесі проектування пропонують досліднику мережі Петрі задачі різного типу. У першому необхідна розробка методів моделювання систем мережами Петрі, а в другому повинні бути розроблені методи реалізації мереж Петрі системами. В обох випадках необхідні методи аналізу мереж Петрі для визначення властивостей моделі.

7.3. Загальна структура мереж Петрі

У мережах Петрі зв'язки за часом замінюються причинно-наслідковими (якщо необхідно здійснити прив'язку до часу, то моменти — інтервали часу представляють як події). Це дозволяє наочно описати структурні особливості функціонування систем.

Побудова моделі дискретної системи

Компоненти системи та їх дія представляються абстрактними подіями. Подія може відбутися (реалізуватися) один раз, повторитися багаторазово, породжуючи конкретні дії (реалізації події) чи не відбутися жодного разу. Сукупність дій, що виникають як реалізації подій при функціонуванні дискретної системи, утворює процес, породжуваний цією системою.

Взаємодія подій у великих асинхронних системах має, як правило, складну динамічну структуру. Ці взаємодії описуються більш просто, якщо вказувати не безпосередні зв'язки між подіями, а ті ситуації, при яких дана подія може реалізуватися.

При цьому глобальні ситуації в системі формуються за допомогою локальних операцій, названих умовами реалізації подій.

Умова має ємність:

- умова не виконана (ємність = 0);

- умова виконана (ємність = 1);
- умова виконана n раз (ємність = $n > 0$).

Умова відповідає таким ситуаціям у модельованій системі, як наявність даних для виконання команди в програмі, стану деякого регістра в пристрої ЕОМ, наявність деталей на конвеєрі.

Операція сполучення умов дозволяє реалізуватися деякій події (передумови подій), а реалізація події змінює деякі умови (постумови події), тобто події взаємодіють з умовами, а умови з подіями.

Тому дискретні системи зручно представити як структури, утворені з елементів двох типів подій та умов.

У мережах Петрі події й умови називають відповідно множиною переходів і множиною позицій. Переходи зображуються бар'єрами |, а позиції - кружечками \circ .


Умови-позиції і події-переходи мають причинно-наслідковий зв'язок, що зображується за допомогою спрямованих дуг, які ведуть з позицій у переходи, а з переходів у позиції.


Позиції, з яких ведуть дуги на даний перехід називають його вхідними місцями (позиціями). Позиції, на які ведуть дуги з даного переходу називаються його вихідними місцями (позиціями).

Виконання умови зображується розміткою відповідної позиції, а саме розміщенням n фішок (маркерів) чи числа n у цю позицію ($n > 0$).

p -  умова p не виконана;

p -  умова p виконана;

p -  умова p виконана 3 рази (має ємність 3);

p -  умова p має ємність 5.

Неформально роботу мережі можна представити як сукупність локальних дій, що називаються спрацьовуванням переходів. Вони відповідають реалізаціям подій і приводять до зміни розмітки місць, тобто локальній зміні умов у системі.

Перехід може спрацьовувати, якщо виконані всі умови реалізації відповідної події.

Спрацьовування переходу – неподільна дія, що змінює розмітку його вхідних і вихідних місць у такий спосіб: з кожного вхідного місця вилучається по одній фішці, а в кожне вихідне місце додається по 1 фішці. Тим самим реалізація події, зображуваної переходом, змінює стан (ємність) безпосередньо зв'язаних з ним умов так, що ємність передумов, що викликали реалізацію цієї події, зменшується, а ємність постумов, на яке воно впливає, збільшується.

Якщо два переходи не мають загальних вхідних місць, то їхні спрацьовування є незалежними діями, здійснюваними послідовно чи паралельно.

Якщо кілька переходів мають загальне вхідне місце, то спрацьовує тільки один (будь-який). При цьому, спрацювавши, цей перехід позбавить можливості спрацювати інші переходи. У такий спосіб у мережі моделюється конфлікт між подіями, коли реалізація однієї події може виключити можливість реалізації інших. У мережі не вказується, яким чином конфлікт варто фактично вирішити. Вважається, що рішення

про те, яку з конфліктних подій варто реалізувати, приймається поза формалізмом мережі, тобто поведження мережі носить невизначений, не детермінований характер.

У процесі функціонування мережі відбувається зміна розміток місць, як результат спрацювання її переходів.

Мережа зупиняється, якщо жоден з її переходів не може спрацювати.

Якщо мережа Петрі описує функціональну схему моделюємої системи, то робота мережі моделює процес, що протікає у часі, а для його вивчення потрібно зафіксувати його у формі деякої «історії процесу».

Структура мережі Петрі

Структура мережі Петрі визначається її позиціями (множина P), переходами (множина T), вхідною функцією I та вихідною функцією O .

Вхідна функція I відображає перехід t_j у множину позицій $I(t_j)$, що називаються вхідними позиціями переходу.

Вихідна функція O відображає перехід t_j у множину позицій $O(t_j)$, що називаються вихідними позиціями переходу.

У такий спосіб мережа Петрі представляється у вигляді четвірки, що складається з множини позицій (P), множини переходів (T), вхідних функцій ($I: T \rightarrow P$) та вихідних функцій ($O: T \rightarrow P$).

$$МП = (P, T, I, O)$$

$$P = \{p_1, p_2, p_3, p_4, p_5, p_6\}$$

$$T = \{t_1, t_2, t_3, t_4, t_5\}$$

$$I(t_1) = \{p_1\}$$

$$I(t_2) = \{p_3\}$$

$$I(t_3) = \{p_2, p_3\}$$

$$I(t_4) = \{p_4, p_5, p_5, p_5\}$$

$$I(t_5) = \{p_2\}$$

$$O(t_1) = \{p_2, p_3\}$$

$$O(t_2) = \{p_3, p_5, p_5\}$$

$$O(t_3) = \{p_2, p_4\}$$

$$O(t_4) = \{p_4\}$$

$$O(t_5) = \{p_6\}$$

Теоретико-графовим представленням мережі Петрі є двочастковий орієнтований мультиграф. Граф має два типи вузлів: позиції O і переходи $|$.

Еквівалентний $МП = (P, T, I, O)$ граф (рис.7.1) має вигляд:

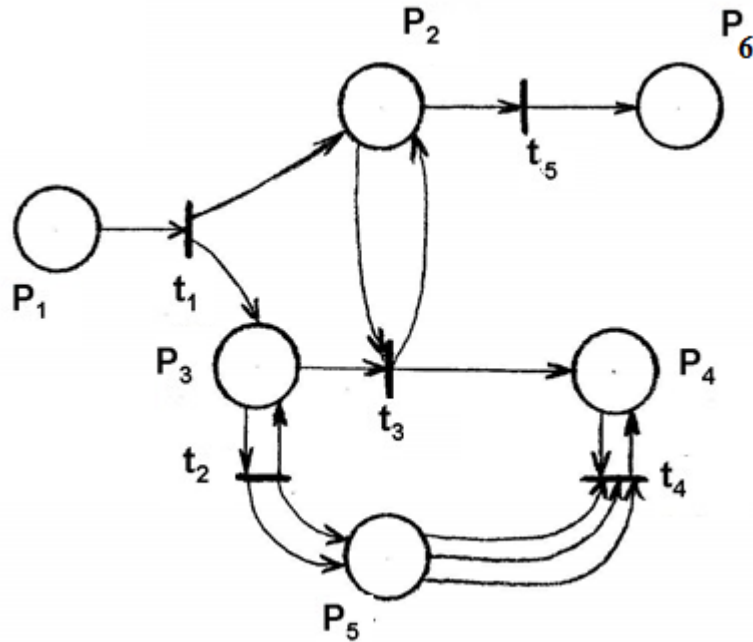


Рис. 7.1 Еквівалентний МП = (P, T, I, O) граф

Маркування мереж Петрі

Маркування μ є присвоєнням фішок позиціям мережі Петрі. Фішки використовуються для визначення виконання мережі Петрі.

Маркування μ мережі Петрі $МП = (P, T, I, O)$ є функція, що відображає множину позицій P в множину невід'ємних цілих чисел: $\mu: P \rightarrow N$.

Маркування може бути представлено як n мірний вектор:

$$\underline{\mu} = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n).$$

Маркування мережі Петрі $M = (МП, \mu)$ є сукупність структури мережі Петрі МП й маркування: $M = (P, T, I, O, \mu)$

7.4. Виконання мереж Петрі

Виконанням мережі Петрі керують кількість і розподіл фішок у мережі. Фішки знаходяться в кружках і керують виконанням переходів мережі.

Мережі Петрі виконується за допомогою запусків переходів. Перехід запускається видаленням фішок з його вхідних позицій і утворенням нових фішок, що поміщаються в його вихідні позиції.

Перехід може запускатися тільки в тому випадку, коли він дозволений. Перехід називається дозволеним, якщо кожна з його вхідних позицій має число фішок принаймні рівне числу вхідних дуг.

Перехід запускається видаленням усіх фішок з його вхідних позицій і наступним переміщенням у кожен з його вихідних позицій по одній фішці для кожної дуги. Запуск переходу змінює маркування $\mu \rightarrow \mu'$. Можна запустити тільки дозволений перехід. Якщо яка-небудь вхідна позиція переходу не має достатньої кількості фішок, то перехід не дозволений і не може бути запущений.

Приклад

Розглянемо марковану мережу, граф якої представлено на рис. 7.2.

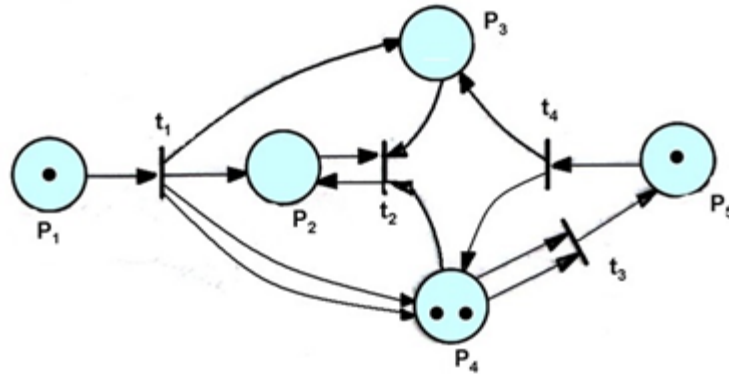


Рис.7.2. Початкове маркування мережі Петрі

Як можна бачити, дозволено три переходи: t_1, t_3, t_4 , а перехід t_2 не дозволений, тому що p_2, p_3 не містять фішок. Будь-який з дозволених переходів t_1, t_3, t_4 може бути запущений. Якщо запущено деякий перехід t_j , то віддаляється фішка з кожного входу і поміщається фішка в кожен вихід.

Якщо запущений перехід t_4 , то одна фішка вилучається з p_5 , одна фішка поміщається в p_3 і одна в p_4 (буде 3 фішки). Отримаємо нове маркування в результаті запуску t_4 :

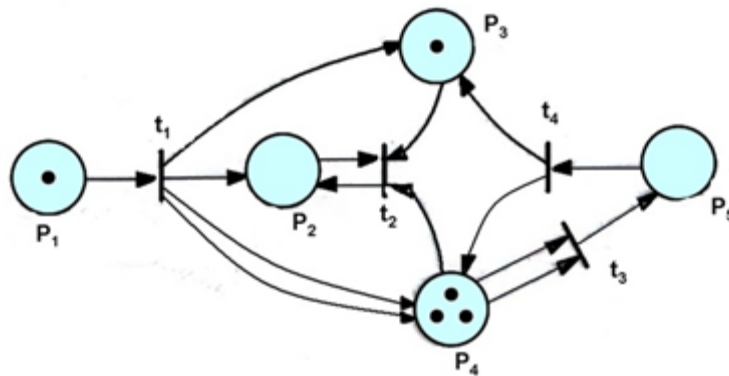


Рис.7.3. Маркування в результаті запуску t_4

У мережі Петрі на рис.7.3 дозволени переходи t_1, t_3 . Якщо спрацює t_1 , то в p_3 буде 2 фішки, 1 фішка в p_2 і 5 фішок у p_4 (додається 2 фішки у відповідності з кратністю виходу), як ми бачимо на рис.7.4:

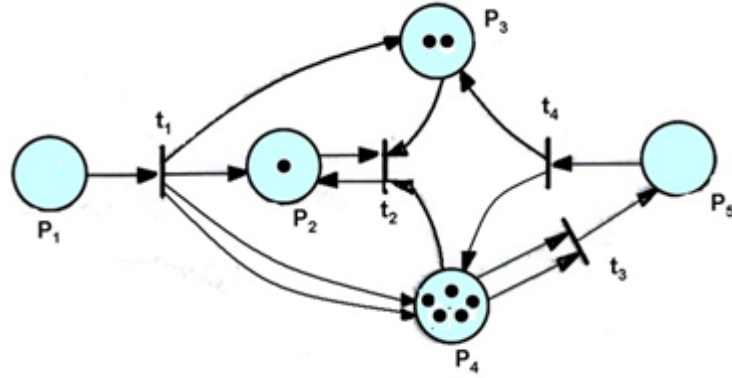


Рис.7.4. Маркування в результаті запуску t_1

У мережі Петрі на рис.7.4 дозволено переходи t_2, t_3 . Запуск переходу t_3 утворить нове маркування.

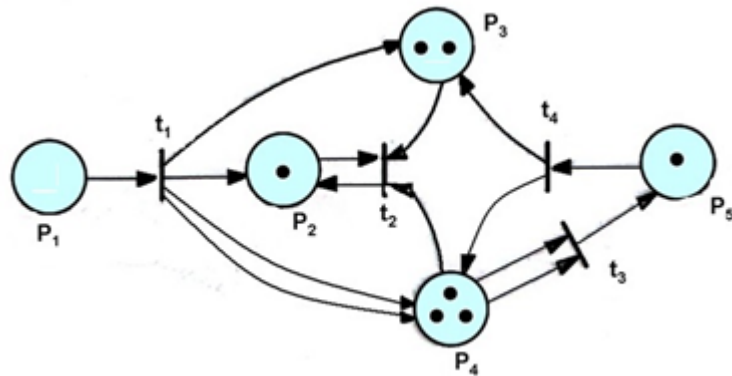


Рис.7.5. Маркування в результаті запуску t_3

Запуски можуть здійснюватися доти, доки існує хоча б один дозволений перехід.

7.5. Простір станів мережі Петрі

Стан мережі Петрі визначається її маркуванням. Запуск переходу змінює стан мережі Петрі за допомогою зміни маркування мережі.

Простір станів мережі Петрі, що має n позицій, є множиною усіх маркувань.

Функція зміни стану $\delta(\mu, t_j)$ не визначена, якщо при маркуванні μ перехід t_j не дозволений. Якщо t_j дозволений, то $\delta(\mu, t_j) = \mu'$, де μ' є маркування, отримане після запуску переходу t_j .

При виконанні мережі Петрі утворюються дві послідовності: послідовність маркувань $(\mu^0, \mu^1, \mu^2, \dots)$ і послідовність переходів, що були запуснені: $(t_{j_0}, t_{j_1}, t_{j_2}, \dots)$. Ці послідовності зв'язані співвідношенням: $\delta(\mu^k, t_{j_k}) = \mu^{k+1}$ для $k = 0, 1, 2, \dots$

Маючи μ_0 і послідовність переходів легко одержати послідовність маркувань мережі Петрі. А маючи послідовність маркувань також можна одержати послідовність переходів.

У такий спосіб послідовності представляють опис виконання мережі Петрі.

7.6. Використання мереж Петрі

Наведемо приклади систем, що моделюються за допомогою мереж Петрі. Вони дають загальне уявлення про метод моделювання і про властивості, якими повинні володіти моделюємі системи.

Події й умови

Події – це дії, що мають місце в системі. Виникнення подій керує стан системи. Стан системи може бути описано безліччю умов. Умова — є предикат чи логічний опис стану системи. Умова може приймати або значення «*true*» або значення «*false*».

Одночасність і конфлікт

У моделі мережі Петрі дві дозволених не взаємодіючих події можуть відбуватися незалежно одна від одної. Синхронізувати події немає потреби доти, доки це не потрібно самій системі, що моделюється. У такий спосіб мережі Петрі представляються ідеальними для моделювання систем з розподіленим керуванням, у якій кілька процесів виконуються одночасно.

Інша важлива особливість мереж Петрі – це відсутність виміру часу.

Виконання мережі Петрі (чи поведження системи, що моделюється) розглядається тут як послідовність дискретних подій. Порядок появи подій є одним з можливих, що допускається основною структурою. Це приводить до явної недетермінованості у виконанні мережі Петрі. Якщо в якийсь момент дозволено більш одного переходу, то будь-який з декількох можливих переходів може стати наступним, що буде запущеним. Вибір переходу, що запускається, здійснюється недетермінованим чином, тобто випадково.

При аналізі динамічного поведження мережі Петрі для спрощення звичайно вводять наступні обмеження: запуск переходу (події) розглядається як миттєва подія і виникнення двох подій одночасно неможливо. Подія, що моделюється таким чином, називається примітивною (миттєва і неодночасна подія).

Непримітивна подія, тобто подія тривалість якої $\neq 0$, може бути розділена на дві: початок події А та кінець події А і, таким чином, може моделюватися мережею Петрі.

Іноді в мережі Петрі непримітивна подія зображується прямокутником, а примітивна ризикою $|$. Зображення у виді прямокутника може мати істотне значення при моделюванні складних систем на кількох ієрархічних рівнях, тому що це дозволяє виділити в окремий елемент мережі цілі підмережі.

Області, у яких події відбуваються асинхронно і незалежно, є ідеальними для застосування апарата мереж Петрі.

Програмне забезпечення ЕОМ

Найчастіше мережі Петрі використовуються для моделювання програмного забезпечення. Покажемо, як мережі Петрі можуть моделювати різні системи взаємодіючих процесів. Спочатку розглянемо, як мережа Петрі може бути представлена одним процесом, а потім шляхом комбінації мереж Петрі, що представляють декілька процесів, одержимо систему рівнобіжних процесів.

Блок-схеми

Програма представляє два різних аспекти процесу: обчислення і керування. Мережі Петрі вдало представляють структуру керування програмою. Стандартний спосіб представлення структури керування програм - це блок-схеми. Блок-схема може бути представлена у вигляді вузлів двох типів: прийняття рішень (ромби) і обчислення (прямокутники) і дугами. При зображенні блок-схеми мережею Петрі заміняємо вузли блок-схеми на переходи мережі Петрі, а дуги блок-схеми на позиції мережі Петрі. Кожна дуга відповідає одній позиції в мережі Петрі. Вузли блок-схеми в мережі Петрі представляються як можна бачити на рис.7.6.

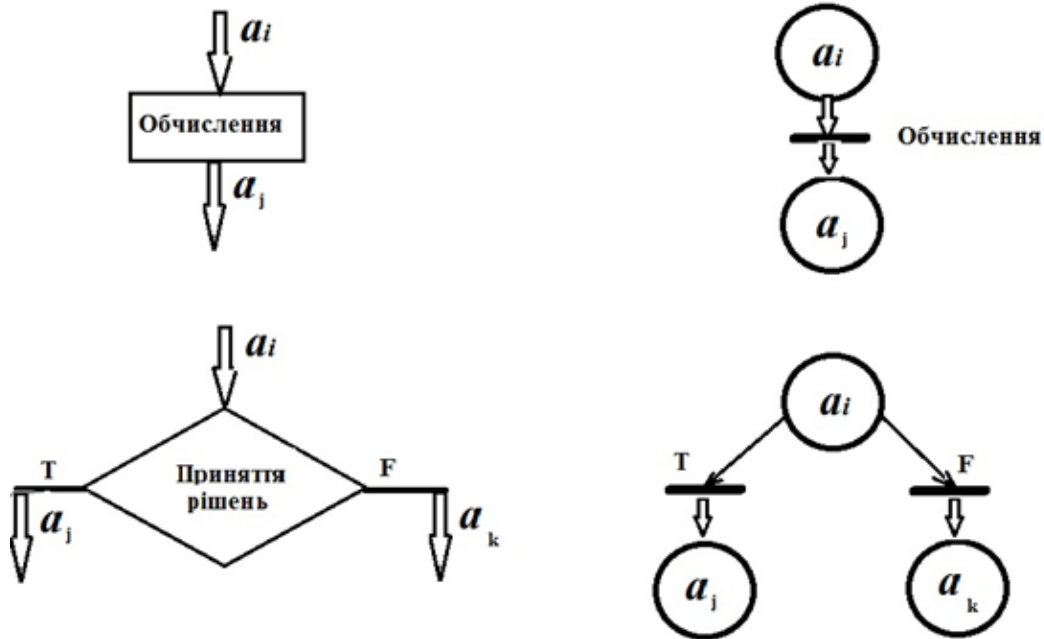


Рис. 7.6. Відповідність елементів блок-схеми елементам мережі Петрі

Переходи зв'язані з прийняттям рішень вводять у мережу конфлікт. Вибір способу рішення конфлікту або недетермінований, або їм можна керувати із зовні (ознакою, що обчислює істинність чи хибність предиката і подальший запуск потрібного переходу).

7.7. Аналіз мереж Петрі

Задачі аналізу мереж Петрі

Безпека – позиція мережі Петрі називається безпечною, якщо число фішок у ній ніколи не перевищує 1. Мережа Петрі безпечна, якщо безпечні всі позиції мережі.

Обмеженість – позиція мережі Петрі називається k -обмеженою, якщо кількість фішок у ній не може перевищувати ціле число k .

Збереженість – (сувора збереженість) – загальна кількість фішок у мережі Петрі постійна. Дуже сильна вимога. З неї випливає, що число входів повинно дорівнювати числу виходів.

Активність – перехід називається активним, якщо він не заблокований (нетупиковий).

Рівні активності:

Рівень 0 — перехід має активність рівня 0, якщо він ніколи не може бути запущений. Такий перехід називається пасивним.

Рівень 1 — перехід t_j має активність рівня 1. Якщо він потенційно може бути запущеним, тобто існує деяке маркування μ' , що t_j дозволений.

Рівень 2 — перехід t_j має активність рівня 2, якщо для всякого цілого n існує послідовність запусків, у якій t_j є присутнім $\geq n$ раз.

Рівень 3 — перехід t_j має активність рівня 3, якщо існує нескінченна послідовність запусків, у якій t_j є присутнім необмежене число.

Рівень 4 — перехід t_j має активність рівня 4, якщо $\forall \mu'$ існує така послідовність запусків σ , що t_j дозволено в $\delta(\mu', \sigma)$. Перехід 4-го рівня називається активним.

Досяжність – основна задача мережі Петрі. Аналіз досяжності полягає у тому, щоб для заданого наперед маркування сказати, чи можливо в принципі, що воно може бути досягнене при заданій структурі МП.

7.7.1. Методи аналізу досяжності

Існує два основних методи аналізу досяжності:

1) Дерево досяжності.

Існує алгоритм побудови дерева досяжності. Дерево досяжності можна використовувати для вирішення задач безпеки, обмеженості, збереження і покриття. Дерево досяжності не обов'язково містить достатню інформацію для вирішення задач досяжності й активності, хоча в деяких випадках це можливо.

2) Матричні рівняння.

Другий підхід до аналізу мережі Петрі заснований на матричному представленні мережі Петрі. Альтернативним стосовно визначення мережі Петрі у вигляді (P, T, I, O) є визначення двох матриць A^+ та A^- , що представляють вхідні і вихідні функції. Кожна матриця має m рядків (по числу переходів), і n стовпців (по числу позицій). Матрична форма визначення мережі Петрі (P, T, A^-, A^+) еквівалентна стандартній формі, використовуваної нами, але дозволяє дати визначення в термінах векторів і матриць. Матрична теорія мережі Петрі є інструментом для вирішення проблеми досяжності. Матричний підхід до аналізу мережі Петрі перспективний, але має деякі труднощі. Насамперед, матриця D не відбиває структуру мережі Петрі. Переходи, що мають як входи, так і виходи з однієї позиції (петлі) представляються відповідно елементами матриць A^- та A^+ , але потім взаємно знищуються в матриці $A = A^+ - A^-$. Інша проблема - це відсутність інформації про послідовність у векторі запуску.

7.7.2. Приклад аналізу досяжності

Дослідити, чи досягне маркування $md = (0, 2, 1, 2, 1, 2)$ із початкового маркування $m0 = (0, 1, 1, 0, 0, 0)$ у мережі Петрі, що задана матрицями вхідних та вихідних функцій A^+ та A^- . Для рішення поставленої задачі використаємо математичний пакет Mathcad.

Позначимо $A = A^+$, та $B = A$. Після чого треба виконати наступні дії для встановлення можливості досягнути маркування md із початкового $m0$:

$$m0 := \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad md := \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \\ 1 \\ 2 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix} \quad A := \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad B := \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$C := B - A \quad C = \begin{pmatrix} -1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -3 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad m := md - m0 \quad m = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 2 \\ 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Необхідна (але не достатня) умова досяжності маркування – це наявність рішення системи $B - A = m$:

$$m = C^T X \quad C1 := \text{augment}(C^T, m)$$

$$C1 = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 & -3 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad C^T = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{rank}(C^T) = 4 \quad \text{rank}(C1) = 5$$

Висновок. Ранг розширеної матриці не рівний рангу основної, тому система рішення не має і маркування $md = (0, 2, 1, 2, 1, 2)$ не є досяжним.

7.8. Запитання та завдання для самоперевірки

1. Що таке мережа Петрі й для моделювання яких процесів вона використовується?
2. Які характеристики мережа Петрі має як граф?
3. Аналітичне та графічне представлення мереж Петрі, взаємне перетворення. Навести приклади.
4. Які засоби опису стану системи в мережах Петрі? Навести приклади.
5. Що таке маркування мережі та як воно працює? Показати на прикладі.
6. Поясніть, як спрацьовують переходів в мережах Петрі. Показати на прикладі.
7. Як проаналізувати досяжність деякого стану системи, визначеного маркуванням початковим та кінцевим маркуванням?
8. Дати пояснення реалізованій послідовності станів системи на прикладі лабораторної роботи.

Розділ 8. Метод системної динаміки Дж. Форестера

Одна з найбільш характерних рис, що відрізняють поведінку сучасного світу – його динамічність. Глобальні зміни у технологіях, населенні, економічній активності перетворюють світ. Ці перетворення мають як позитивний, так і негативний ефект, наприклад глобальні екологічні перетворення ставлять під загрозу наше подальше існування. Тому ще в минулому столітті було усвідомлено необхідність пошуку нових шляхів мислення і дій у складних ситуаціях. Почав розвиватися системний підхід – здатність бачити світ як складну систему, в якій все взаємопов'язано. В даний час існує багато напрямків розвитку системного підходу і навіть постулюється, що розвиток системного підходу і системного мислення є ключовим для виживання людства. Проблема системного підходу сьогодні – як рухатись від узагальнених описів і системного мислення до інструментів і процесів, що допоможуть зрозуміти складність задач і спрямувати наші дії від локальних підсистем до глобальних систем.

Системна динаміка є таким напрямком у вивченні складних систем, що досліджує їх поведінку в часі в залежності від структури елементів системи та взаємодії між ними, у тому числі причинно-наслідкових зв'язків, петель зворотного зв'язку, затримок реакції, впливу середовища та інших.

Апарат системної динаміки є одним з найбільш потужних інструментів, які використовуються в наш час для аналізу і проектування складних систем, особливо систем, що містять петлі оберненого зв'язку. Динамічні моделі не здатні формувати свій власний розв'язок у тому вигляді, який маємо в аналітичній моделі. Вони можуть бути лише засобом аналізу поведінки системи в умовах, що визначаються експериментатором. Отже, системна динаміка – не теорія, а методологія розв'язання проблем.

8.1. Виникнення та розвиток методів системної динаміки

Системна динаміка була створена в середині 1950-х років Дж. Форестером з МТІ, первісною метою якої було застосувати науковий та інженерний досвід до з'ясування фундаментальних причин успішності та провалу корпорацій. На початку 1960-х Дж. Форестер з командою аспірантів просунув системну динаміку від ручних обчислень до формального комп'ютерного моделювання. Створена в цей час мова системної динаміки DYNAMO стала промисловим стандартом на наступні тридцять років. У 1961 Дж. Форестер опублікував книгу "Індустріальна динаміка", що стала класичною. До кінця 1960-х системна динаміка застосовувалася виключно до корпоративно-управлінських проблем. Однак після зустрічі в 1968 р. Дж. Форестера з Дж. Коллінзом, колишнім мером Бостона, метод набув подальшого застосування до моделювання міста як динамічної системи. Після участі Дж. Форестера у зустрічі Римського клубу в Берні у 1970 виникла ще одна область застосування системної динаміки. Римський клуб – організація, діяльність якої полягає в прогнозуванні шляхів розвитку людства і виявленні можливих кризових ситуацій, наприклад глобальної кризи, викликані обмеженими ресурсами Землі в поєднанні з експоненціально зростаючим населенням. Була здійснена спроба застосувати апарат системної динаміки до моделювання людства. Дж. Форестер розробив першу схему моделі світової соціо-економічної системи. Цю модель він назвав World1. Остання модель, описана в книзі "Світова динаміка", відома як World2.

Розглянемо математичне формування моделі Дж.Форестера World2, що була створена для цілей дослідження сталого розвитку. Саме у цій моделі відбувся якісний стрибок від дослідження промислових і урбанізованих систем до глобальної макросистеми.

Метод системної динаміки базується на припущенні, що для основних фазових змінних (рівні) пишуть диференційні рівняння одного і того типу:

$$\frac{dy}{dt} = y^+ - y^-, \quad (8.1)$$

де y^+ – позитивний темп швидкості змінної y , що включає у себе усі фактори які викликають зростання змінної y ; y^- – від’ємний темп швидкості, який включає у себе усі фактори які викликають зменшення величини y .

Вважається, що ці темпи (або потоки) розчіплюються на добуток функцій, які залежать лише від «факторів» - комбінацій основних змінних, тобто в свою чергу функцій, які є функціями системних рівнів:

$$y^\pm = g(y_1, y_2, \dots, y_n) = f(F_1, F_2, \dots, F_k) = f_1(F_1) f_2(F_2) \dots f_k(F_k), \quad (8.2)$$

де $F_j = g_j(y_{i_1}, \dots, y_{i_m})$ – фактори, причому $m = m(j) < n, k = k(j) < n$ (кількість рівнів).

Тобто факторів менше, ніж основних змінних, і кожний фактор залежить не від усіх рівнів, а лише від деякої їх частини, що дозволяє спростити задачу моделювання.

8.2. Реалізація методу системної динаміки Форестера

Системо-динамічна модель складається з набору абстрактних елементів, що представляють певні властивості модельованої системи (рис.8.1). Виділяють такі типи елементів:

Рівні – характеризують накопичені значення величин всередині системи. Це можуть бути товари на складі, товари в дорозі, банківська готівка, виробничі площі, чисельність працюючих. Рівні можуть бути застосовані не тільки до фізичних величин. Наприклад, рівень обізнаності істотний при прийнятті рішення. Рівні задоволення, оптимізму і негативних очікувань впливають на економічну поведінку. Рівні представляють собою значення змінних, накопичені в результаті різниці між вхідними та вихідними потоками. На діаграмах зображуються прямокутниками.

Потоки – відображають швидкості зміни рівнів. Наприклад, потоки матеріалів, замовлень, грошових коштів, робочої сили, обладнання, інформації. Зображуються суцільними стрілками.

Функції рішень (**вентилі**) – функції залежності потоків від рівнів. Функція рішення може мати форму простого рівняння, що визначає реакцію потоку на стан одного або двох рівнів. Наприклад, продуктивність транспортної системи може бути виражена кількістю товарів в дорозі (рівень) і константою (запізнювання на час транспортування). Більш складний приклад: рішення про наймання робітників може бути пов'язано з рівнями наявної робочої сили, середнього темпу надходження замовлень, числа працівників, що проходять курс навчання, числа новоприйнятих працівників, заборгованості по невиконаним замовленням, рівня запасів, наявності обладнання та матеріалів. Зображуються двома трикутниками.

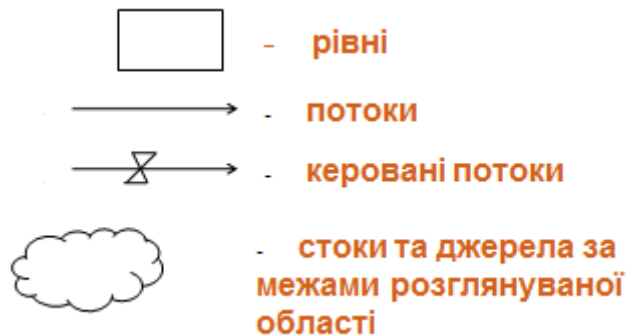


Рис.8.1. Елементи потокової діаграми моделі

Канали інформації, що з'єднують вентилі з рівнями. Зображуються штриховими стрілками.

Лінії затримки (запізнення) служать для імітації затримки потоків. Характеризуються параметрами середнього запізнення і типом несталої реакції, який параметр характеризує відгук елемента на зміну вхідного сигналу. Різні типи ліній затримки мають різний динамічний відгук.

Допоміжні змінні розташовуються в каналах інформації між рівнями і функціями рішень та визначають деяку функцію. Зображуються колом.

Усі системи, незалежно від складності, мають велику кількість позитивних і негативних обернених зв'язків, а вся динаміка є результатом взаємодії петель цих зв'язків друг з другом. Не дивлячись на те, що може існувати лише два типи петель

оберненого зв'язку, моделі можуть містити тисячі петель обох типів, що поєднані друг з другом з багатократними часовими затримками і нелінійностями. Інтуїція може дозволити нам вивести динаміку ізольованих зв'язків з цієї множини петель, проте коли ці петлі взаємодіють багатократно, не так просто визначити майбутню динаміку.

Оскільки системна динаміка є результатом взаємодії обернених зв'язків, то й дослідження систем базується на їх вивченні. Ми приймаємо рішення, які змінюють реальний світ; збираємо інформацію по обернених зв'язках, і, використовуючи нову інформацію, переглядаємо наше розуміння світу і рішень, які ми повинні прийняти, щоб підвести наше сприйняття системи ближче до наших цілей. Обернений зв'язок між реальним світом і людиною, що приймає рішення включає усі форми інформації.

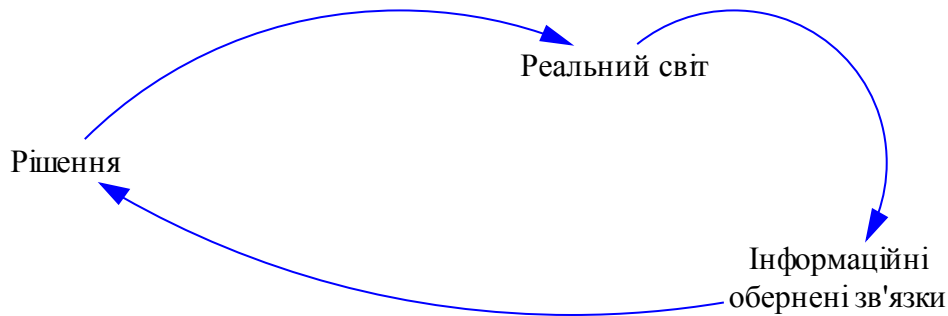


Рис. 8.2. Дослідження як процес з оберненими зв'язками

Принципи побудови моделей

Будь-яка соціально-економічна система може бути описана безліччю системно-динамічних моделей. Вибір факторів, що підлягають включенню в модель, обумовлений тими питаннями, на які необхідно дати відповідь. Тому треба включати в модель технічні, правові, організаційні, економічні, психологічні, трудові, грошові та історичні чинники, які повинні знайти своє місце при визначенні взаємодії елементів системи. Кожний з цих чинників може суттєво впливати на поведінку системи.

Зазвичай, найбільш важливі моделі включають від 30 до 3000 змінних. Їх кількість обмежується нашими можливостями сприйняття системи та всіх її взаємозв'язків. Слід приділяти особливу увагу таким аспектам досліджуваної системи, як:

- часові залежності,
- посилення,
- спотворення інформації.

В цілому метод системної динаміки базується на чотирьох принципах, які впливають на ефективність застосування методу.

Перший принцип: динаміку поведінки довільного, як-завгодно складного процесу можна звести до зміни значень деяких «рівнів», а самі зміни регулювати потоками, які наповнюють або вичерпують рівні.

Рівень акумулює загальну кількість «продукту», який досліджується і є результатом потоків які входять у нього (ці значення додаються) або виходять з нього (ці значення віднімаються від величини рівня). Системні рівні повністю описують стан системи в довільний момент часу. Значення рівнів являють собою інформацію,

необхідну для прийняття рішень і обґрунтування керуючих впливів на систему. Рівні забезпечують систему інерцією та «пам'яттю» станів, вони створюють затримки між припливом і відтоком як причиною і наслідком.

Поняття рівнів і потоків присутні у багатьох областях людських знань. Ось деякі з них: у математиці – це інтеграли і похідні, у фізиці – сталі стани і переходи, у хімії – реагенти, продукти реакції і власне хімічні реакції, в економіці – рівні (наприклад, статок) і потоки (наприклад, трудових ресурсів), в бухгалтерському обліку – запаси і потоки (фінансові та матеріальні), в медицині – стан організму і розповсюдження інфекції та ін. Цей список можна продовжувати ще довго, що вказує на універсальність запропонованого Дж. Форестером першого принципу системної динаміки.

Другий принцип: усі зміни в будь-якій системі зумовлені «петлями обернених зв'язків». Петля оберненого зв'язку – це замкнутий ланцюжок взаємодій, який пов'язує вихідну дію з її результатом, що змінює характеристики оточуючих умов, які, в свою чергу є «інформацією», що викликає зміни.

Третій принцип: петлі оберненого зв'язку в будь-якій системі пов'язані нелінійно. По суті це значить, що інформація про рівні системи через обернені зв'язки опосередковано впливає на рівні у непропорційному і складно передбачуваному режимі.

Четвертий принцип: системна динаміка – суцільно прагматичний апарат, який здатний найбільш адекватно відобразити нетривіальну поведінку мережі взаємодіючих потоків і обернених зв'язків. Його доцільно застосовувати лише тоді, коли традиційні підходи виявляються неефективними, коли поведінка об'єктів не піддається точному математичному опису і можливі лише неточні оцінки.

При побудові моделі її змінні повинні відповідати змінним модельованої системи і вимірюватися в тих же одиницях. Наприклад, потоки товарів повинні вимірюватися натуральними, а не грошовими одиницями. Потоки грошових коштів розглядаються окремо. Товарні і грошові показники пов'язуються цінами. Не можна представляти товари у вигляді відповідних грошових сум, інакше не буде враховано значення цін і той факт, що рух грошей не синхронний руху товарів і т. д.

Слід зауважити, що системно-динамічна модель не обов'язково повинна бути стійкою. Серед існуючих соціально-економічних систем деякі є нестійкими в математичному розумінні. Вони не прямують до стану рівноваги навіть при відсутності зовнішніх збурень. Соціальні системи надзвичайно нелінійні і часто протидіють обмеженням, пов'язаним з нестачею робочої сили, скороченням грошових ресурсів, інфляції, спадом ділової активності, браком коштів виробництва.

Виходячи із всього вищенаведеного, можна виділити три основні області застосування динамічного моделювання і відповідно переваги його застосування в цих областях:

- 1) Складні слабо формалізовані ситуації, у яких неможливе застосування аналітичних методів або вони настільки складні і трудомісткі, що динамічне моделювання дає більш простий спосіб вирішення проблеми.
- 2) Моделювання поведінки систем в ситуаціях, які раніше не зустрічалися. У даному випадку імітація слугує для попередньої перевірки нових стратегій керування системою перед проведенням експерименту на реальному об'єкті.
- 3) Моделювання ситуацій, спостереження за якими ускладнено великою тривалістю їх розвитку або навпаки. В цьому випадку необхідно контролювати розвиток ситуації шляхом прискорення або сповільнення явищ у ході імітації.

8.3. Програмне забезпечення методу

Від появи першого програмного продукту для реалізації методу системної динаміки DYNAMO особлива увага приділяється комп'ютерному моделюванню, можливість якого забезпечується достатньо великою кількістю програмних середовищ.

Як вже було вказано вище, Дж. Форрестер та його колектив створили першу мову для моделювання системної динаміки DYNAMO, яка потім лягла в основу багатьох сучасних програм моделювання: STELLA, Dynasys, POWERSIM, Vensim. Лідером серед цих програм є STELLA (Systems Thinking Experimental Learning Laboratory with Animation). Однак програма Vensim має безкоштовну версію PLE (Personal Learning Edition) й тому використовується частіше в навчальних цілях для моделювання складних систем.

Сучасні програми для моделювання дають змогу відтворювати системи у графічному вигляді через потокові діаграми (рис. 8.2, 8.3). Окрім самих діаграм, можна додавати графічні елементи як позитивний чи негативний цикл процесу й завдяки цьому можна бачити основні залежності між факторами навіть без кількісного аналізу відношень закладених у формули. Взаємозалежні “фактори” зі змінних рівнів та потоків візуально мають вигляд блок-схеми або структурної схеми моделі, що замикаються в певні причинно-наслідкові петлі зворотного зв'язку (feedback loops). Цикли, у свою чергу, залежно від дії факторів збільшують або зменшують кількісні параметри змінних-рівнів, тобто є або позитивними, або негативними.

Програмне рішення Vensim створено корпорацією Ventana Systems Inc., що знаходиться в Гарварді (Масачусетс). Корпорація розробила велику кількість імітаційних моделей, що інтегрували в собі технічні елементи для вирішення складних проблем управління. Кожна з моделей складається із чотирьох частин:

1. Змінні стану (state variables). Це основні змінні, що містять інформацію про цінності, звички, сприйняття тощо.
2. Вторинні змінні (variable inputs). Це змінні, які створюють “ауру” основних змінних, що відображають умови їх функціонування.
3. Постійні параметри (constant inputs (“parameters”)). Це змінні, які демонструють постійність у проміжку часу, у який відбувається імітація поведінки системи.
4. Невизначеності (uncertainties). Це змінні, що є неконтрольованими й можуть набувати будь-якого значення в певному інтервалі під час імітації моделі.

Інструментами програми є причинно-наслідкові діаграми, графічні та текстові алгоритми конструювання моделей. Використовується аналіз чутливості Монте Карло, оптимізація, оперування даними. Vensim включає технології виявлення помилок при побудові моделі, алгоритми для запобігання помилкам та швидкого подання складних результатів. Vensim застосовує ліцензійні технології Causal Tracing, SyntheSim, Reality Check.

Завдяки доступності Vensim може бути використаний при побудові моделей динаміки соціальних процесів в Україні. Гнучкість Vensim як інструмента для побудови різного рівня та класу моделей дає змогу віднести розробку до будь-якого з рівнів мікро- чи макро- соціального. Більше того, конкретну модель можна через ряд параметрів пов'язати з більш широкою моделлю світової динаміки та прослідкувати вплив загальносвітових тенденцій на український соціум.

Ілюстрацію можливостей та технологій програми Vensim можна бачити на прикладі, де метод системної динаміки було застосовано для дослідження сталого

розвитку регіонів України станом на 2010 р. В процесі моделювання в основному використовувались дані Державного комітету статистики України і Головних управлінь статистики відповідних областей. Було запропоновано узагальнену динамічну модель регіонів України у вигляді (рис. 8.3).

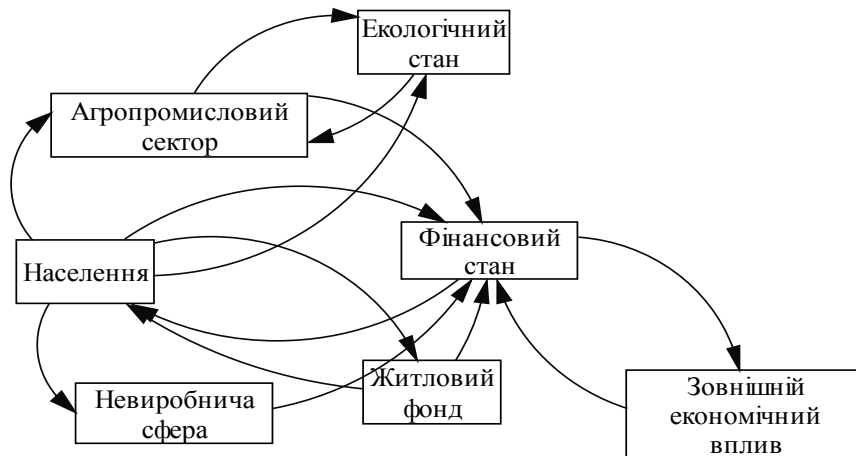


Рис.8.3. Структура соціально-економічної системи регіону

Було проведено дослідження регіонального розвитку областей України за наступними стратегіями:

- 1) Покращення демографічної ситуації.
- 2) Інноваційна стратегія. Дана стратегія передбачає лише збільшення обсягів інвестування у інноваційну діяльність.
- 3) Інноваційно-соціальна стратегія. Ця стратегія є розширенням попередньої стратегії, але крім фінансування інноваційних досліджень у цій стратегії також фінансуються заклади охорони здоров'я і соціальної сфери.
- 4) Стратегія покращення економічних показників. Неофіційна сьогоденна стратегія.

За цими стратегіями на основі побудованої моделі динамічного розвитку регіону у програмі був здійснений короткостроковий та довгостроковий прогноз розвитку майже всіх областей України (дивись Додаток Д). При довгостроковому прогнозуванні була визначена стратегія, що найкраще забезпечуватиме сталий розвиток.

8.4. Запитання та завдання для самоперевірки

1. Що досліджує системна динаміка?
2. На яких принципах побудована динаміка Дж. Форестера?
3. Як працює метод системної динаміки?
4. Коли і як виникла системна динаміка?
5. Яка математична основа системної динаміки?
6. Які основні складові діаграм у системній динаміці?
7. Що ви можете сказати про типи зв'язків у системній динаміці?
8. Які програмні засоби реалізують методи системної динаміки?
9. Наведіть приклад моделі, реалізує метод системної динаміки у програмі Vensim.

Додаток А

Моделювання статичних режимів хіміко-технологічних систем засобами програми Hysys 3.2

Hysys широко застосовується для проведення розрахунків технологічних схем газопереробки, нафтопереробки, нафтохімії і хімії. Ця програма з однаковим успіхом працює в проектних і інжинірингових фірмах, у науково-дослідних інститутах і на заводських установках. За допомогою персонального комп'ютера інженер одержує доступ до досвіду і знань, накопиченим фахівцями усього світу за багато десятиліть.

Ви можете проводити розрахунки:

- ректифікаційних колон довільної конфігурації, включаючи колони з рідинами що розслоюються на тарілках і з хімічними реакціями на тарілках; нафтових колон, гідравліки ректифікаційних колон із сітчатими, клапанними і колпачковими тарілками, і насадочних колон;
- теплообмінних апаратів різних типів: нагрівачів, холодильників, ребойлерів з паровим простором, конденсаторів, повітряних холодильників;
- трубопроводів різних конфігурацій, від горизонтальних до вертикальних, з використанням розроблених методів розрахунку гідравлічних опорів двофазних потоків;
- реакторів: ідеального витиснення й ідеального змішування, рівноважних, стехіометричних, причому реакції можуть протікати в трубі, у довільній ємності, на тарілці ректифікаційної колони.

Ключові особливості Hysys:

- наявність більш 20 різних методів розрахунку термодинамічних і фізичних властивостей; більш 2000 бібліотечних компонентів, більш 16000 пар бінарних коефіцієнтів;
- можливість проводити оптимізаційні розрахунки і "розрахункові дослідження" з автоматичним перебором параметрів;
- вбудовані електронні таблиці (аналог MS Excel), що дозволяють проводити додаткові розрахунки з використанням змінних технологічної схеми;
- використовуючи вбудовану мову програмування (аналог Visual Basic), а також можливості підключення і використання разом із системою Hysys Ваших власних програм, Ви можете розширювати стандартні можливості системи і створювати інтегровані системи технологічних розрахунків.

A.1 Моделювання конверсії оксиду вуглецю

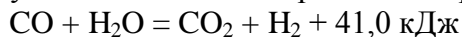
Вихідні дані

Конверсія оксиду вуглецю здійснюється в двох стадій:

1) середньотемпературна стадія - на залізохромовому каталізаторі при температурі не більш 445 °С.

2) низькотемпературна стадія - на цинкмідному каталізаторі при температурі не більш 255 °С.

Процес конверсії оксиду вуглецю з водяною парою йде по реакції:



У середньотемпературном конверторі (поз. 1-А) парогазова суміш проходить зверху вниз через шар каталізатора. У результаті конверсії температура парогазової суміші підвищується до температури не більш 445 °С, об'ємна частка оксиду вуглецю в парогазової суміші (ПГС) з середньотемпературного конвертора знижується до значення не більш 4,0 % (у сухому газі). ПГС із середньотемпературного конвертора (поз. 1-DA) охолоджується в трубній частині котла-утилізатора (поз. 1-С). З котла - утилізатора ПГС надходить у низькотемпературний конвертор (поз. 1-В). Температура ПГС на вході в (поз. 1-DB): 210-250 °С. Температура ПГС на виході з низькотемпературного конвертора – не більш 255 °С. ПГС із низькотемпературного конвертора (поз. 1-В) з об'ємною часткою оксиду вуглецю не більш 0,5 % (у сухому газі) надходить в установку очищення газу від CO₂.

Розрахунки в Hysys

Моделювати шари каталізаторів ми не будемо, дію каталізатора буде враховано в константі швидкості реакції :

$$K = 200 * \exp\left(\frac{-18450}{RT}\right) \quad (\text{A.1})$$

Вихідні дані узяті з режиму роботи агрегату.

Завантажимо Hysys і створимо новий проект – **File > New > Case**. Перед нами відразу з'явиться вікно *Simulation Basis Manager*. Створимо список компонентів *Component List – 1* як на рис. А.1

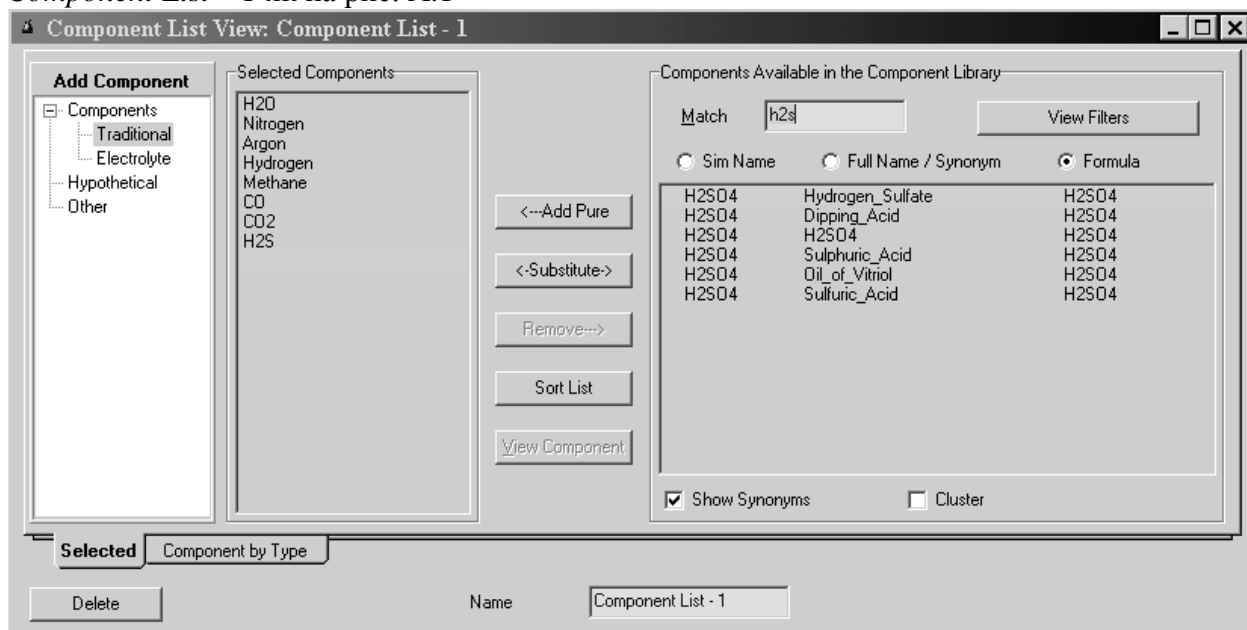


Рис. А.1. Список *Component List*

Закриємо вікно, і перейдемо в закладку визначення реакцій *Reactions*. Для визначення нової реакції натиснемо кнопку *Add Rxn*. У вікні, що з'явилося, виберемо тип реакції – кінетична – *Kinetic* (рис. А.2). У наступному вікні, що з'явилося, введемо інформацію відповідно рис. А.3.

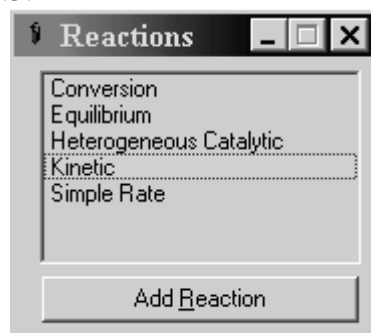


Рис. А.2. Вибір типу реакції

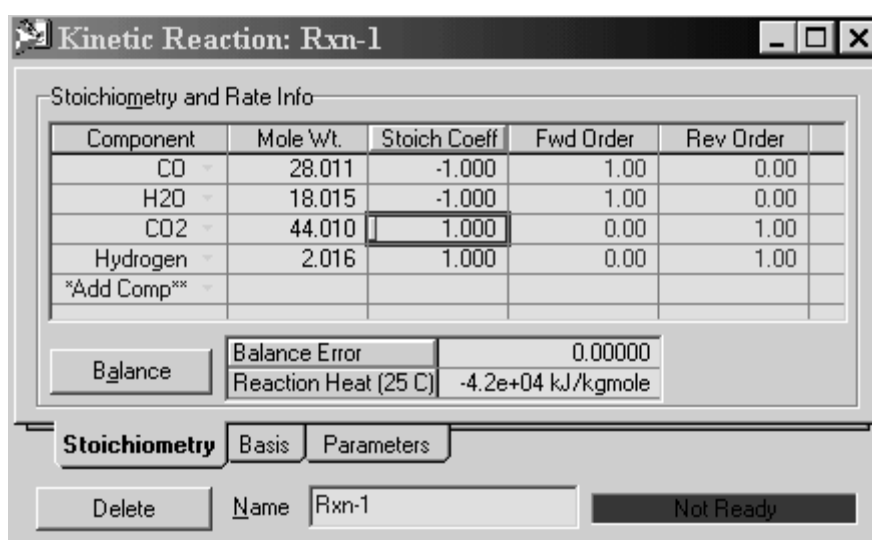


Рис. А.3. Стехіометрія реакції конверсії окису вуглецю

У закладці *BASIS* введемо інформацію відповідно рис. А.4.

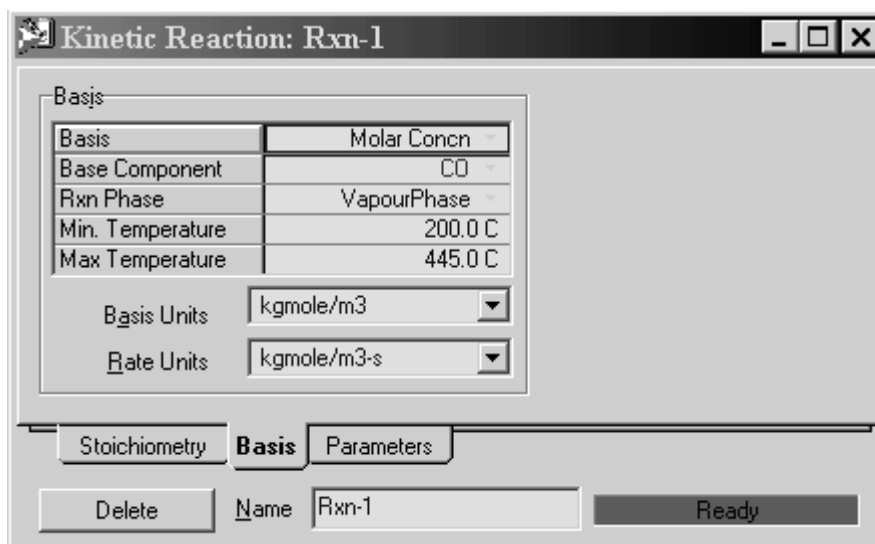


Рис. А.4. Настроювання реакції

У закладці *Parameters* введемо інформацію відповідно рис. А.5.

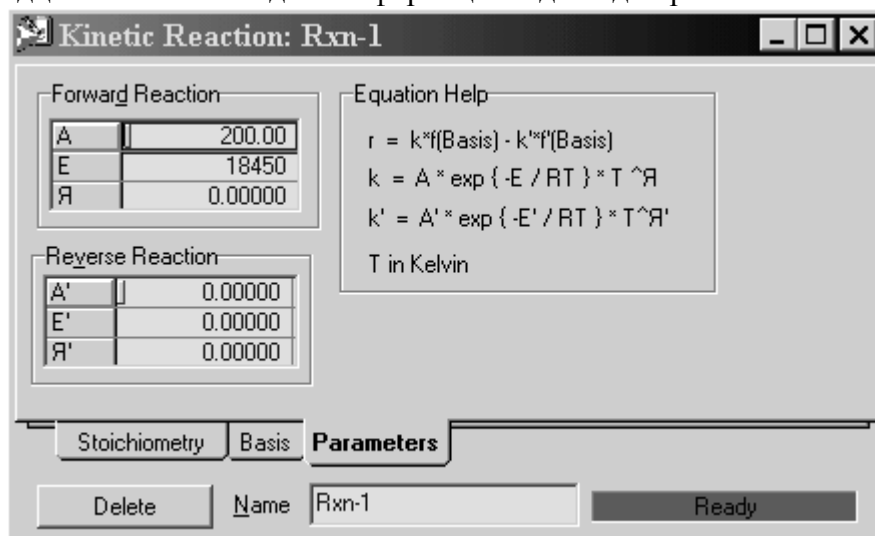


Рис. А.5. Визначення параметрів рівняння Аррениуса

Реакція тепер цілком визначена, закриємо вікно її визначення.

Додамо її в список реакцій. Для цього натиснемо *Add Set*. У списку *Active List* вікна, що з'явилося, *Reaction Set* виберемо знову створену реакцію *Rxn-1* для включення реакції в список *Set-1* (рис. А.6).

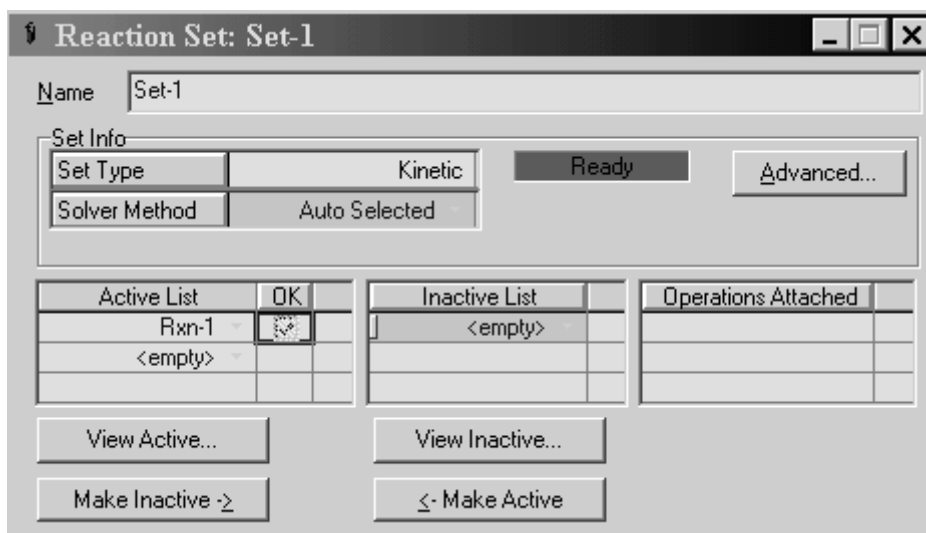


Рис. А.6. Додавання реакції в список реакцій

Закриємо вікно *Reaction Set* і перейдемо на закладку *Fluid Pkgs*. Для додавання нового *Fluid Package* натиснемо кнопку *Add*. З'явиться вікно як на рис. А.7. Ім'я *BASIS-1* дане за замовчуванням залишимо без змін. У списку *Property Package Selection* виберемо *Peng-Robinson*.

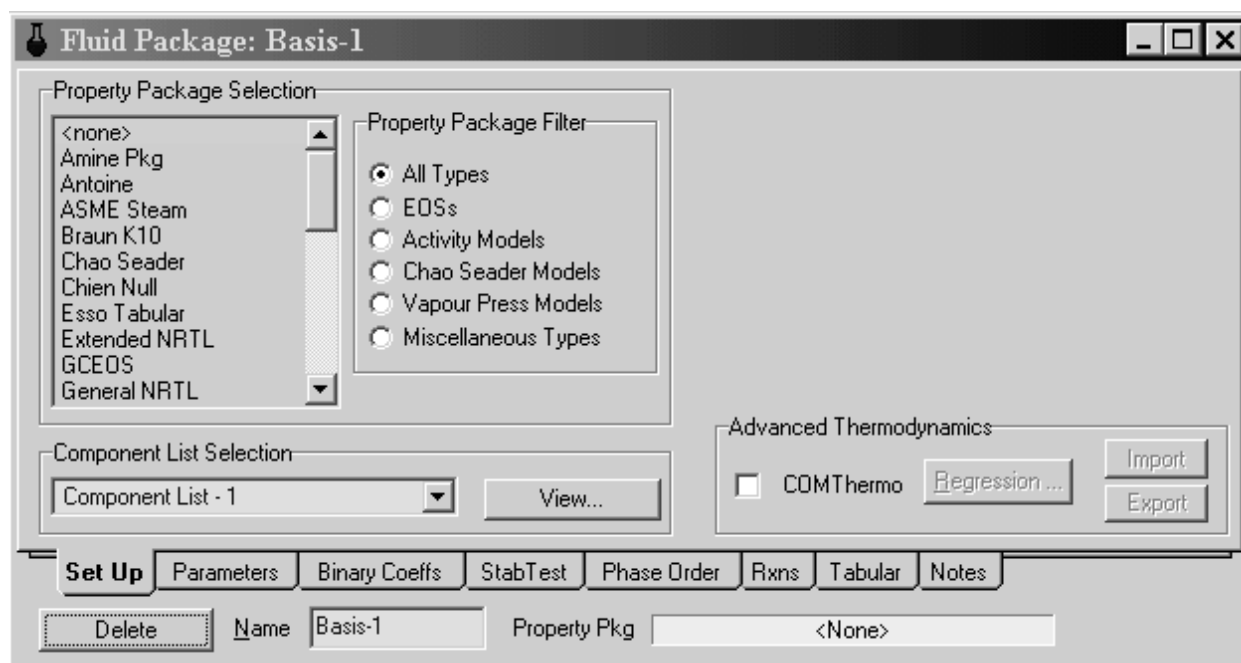


Рис. А.7. Вікно Fluid Package

На закладці *Rxns* вікна *Fluid Package* додамо в проєкт реакцію, вибравши *Set-1* і натиснувши *<-- Add Set* (рис. А.8).

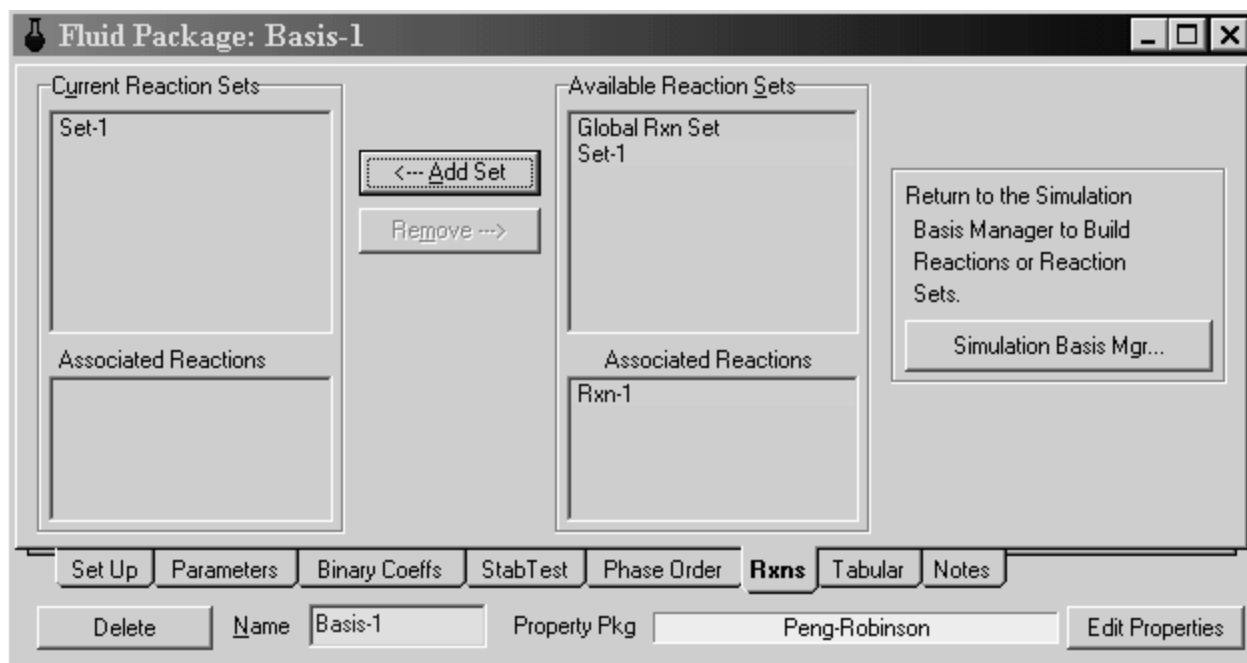


Рис. А.8. Вікно Fluid Package - Rxns

Цих настроювань досить щоб перейти безпосередньо до моделювання процесу. Натиснувши кнопку *Enter Simulation Environment* перейдемо у вікно моделювання. У вікні інструментів *Case(Main)*, що розташована в правій частині екрана, виберемо *Material Stream*, і потім натиснемо один раз лівою клавішею мишки в поле *PFD*. Для визначення параметрів потоку клацнемо по ньому два рази лівою клавішею миші. Перейдемо в закладку *Composition*, де визначимо склад потоку як на рис. А.9.

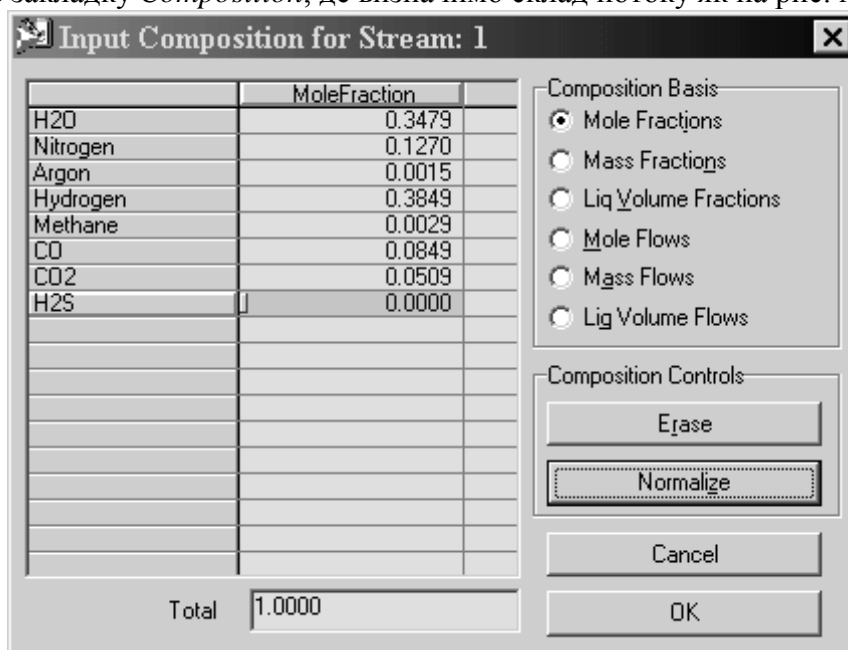


Рис. А.9. Визначення складу вхідного потоку

Натиснемо кнопку ОК і перейдемо в закладку *Conditions*, де введемо наступну інформацію: *Temperature* – 320 C; *Pressure* – 1 atm = 2354 kPa; *Mass Flow* – 150100 kg/h.

Додамо в модель сепаратор (*Separator*). Введемо його параметри як на рис. А.10. Перейдемо в закладку *Rating* і визначимо об'єм сепаратора: *Volume* – 80m³.

Перейдемо до закладки *Reactions*. У списку *Reaction Set* виберемо *Set-1* (рис. А.11). Схема буде розрахована. У даному випадку сепаратор спрацював як реактор. Результати розрахунків можна побачити на закладці *Worksheet-Conditions* (рис.А.12) і *Worksheet-Composition* (рис.А.13).

Додамо в модель елемент *Cooler*. Перейдемо до визначення параметрів холодильника і визначимо їх згідно рис. А.14 і рис.А.15.

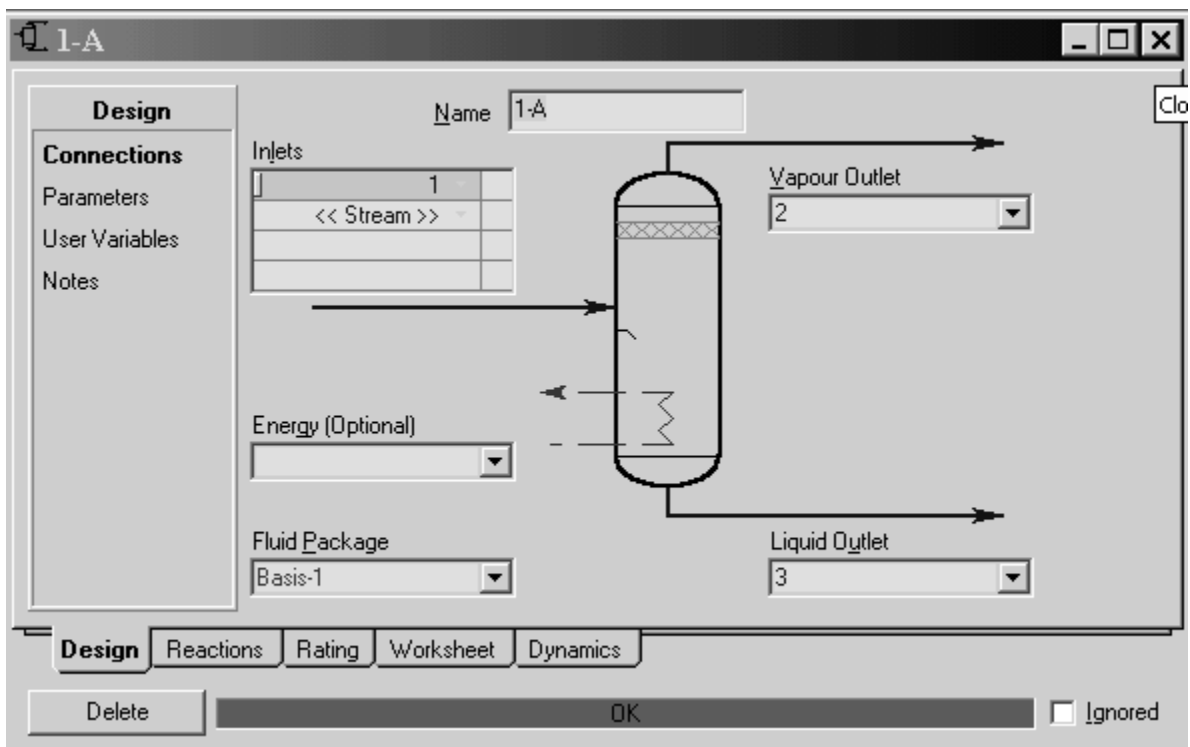


Рис. А.10. Основні параметри сепаратора

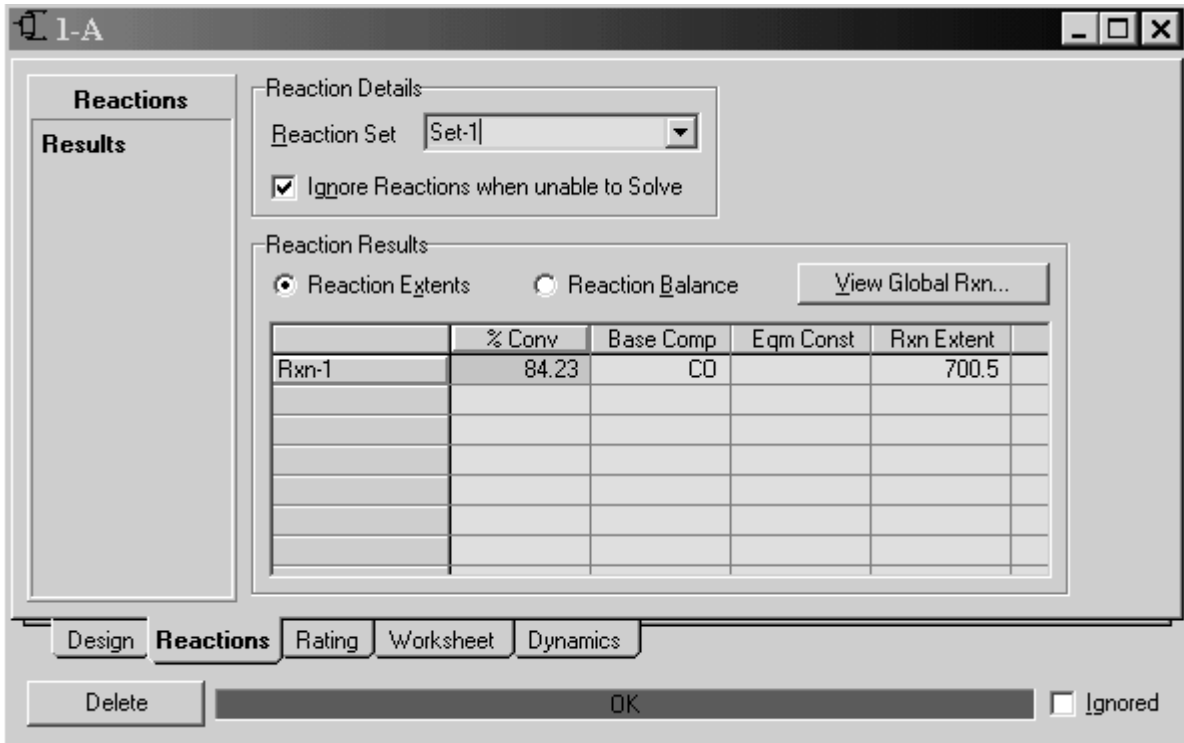


Рис. А.11. Прив'язка реакцій до сепаратора

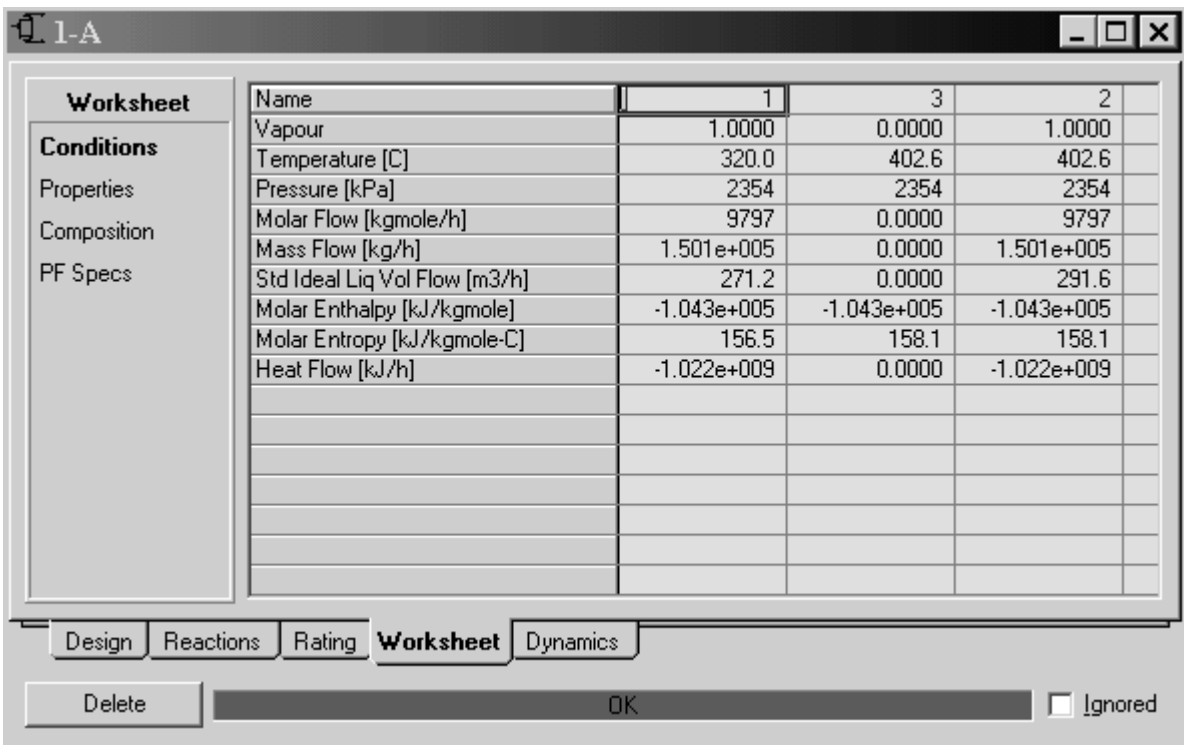


Рис. А.12. Результати розрахунку реактора 1-A

	1	3	2
H2O	0.3479	0.2766	0.2764
Nitrogen	0.1270	0.1270	0.1270
Argon	0.0015	0.0015	0.0015
Hydrogen	0.3849	0.4563	0.4564
Methane	0.0029	0.0029	0.0029
CO	0.0849	0.0134	0.0134
CO2	0.0509	0.1224	0.1224
H2S	0.0000	0.0000	0.0000

Buttons: Design, Reactions, Rating, **Worksheet**, Dynamics
 Delete, OK, Ignored

Рис. А.13. Результати розрахунку реактора 1-А (склади потоків)

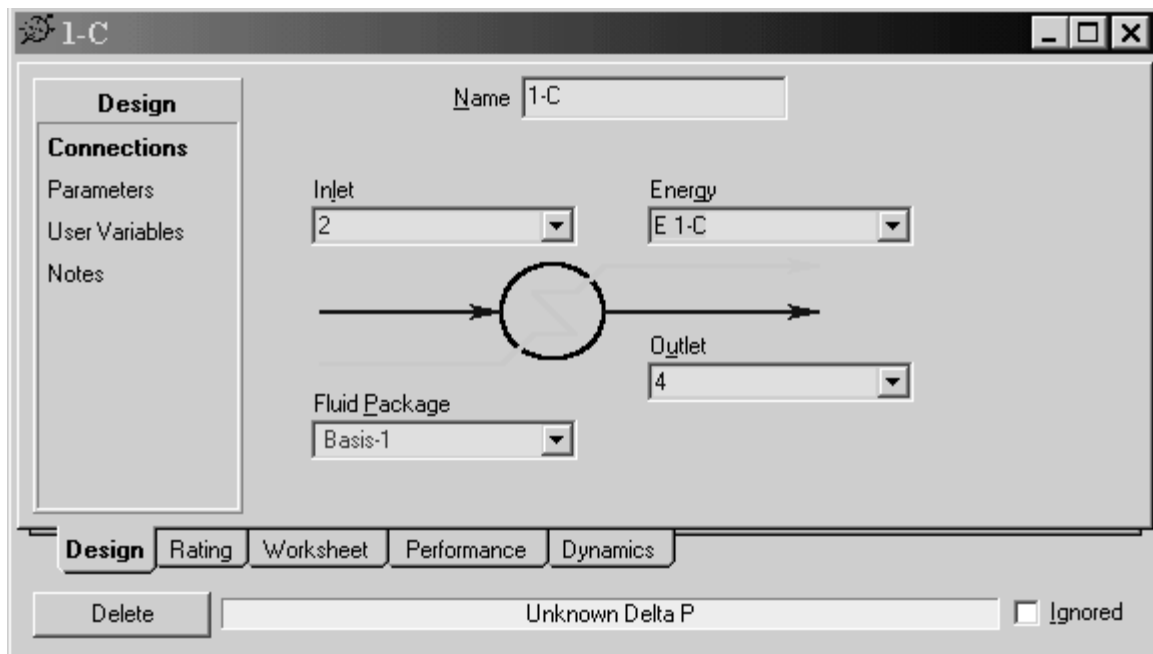


Рис. А.14. Визначення параметрів холодильника 1-С

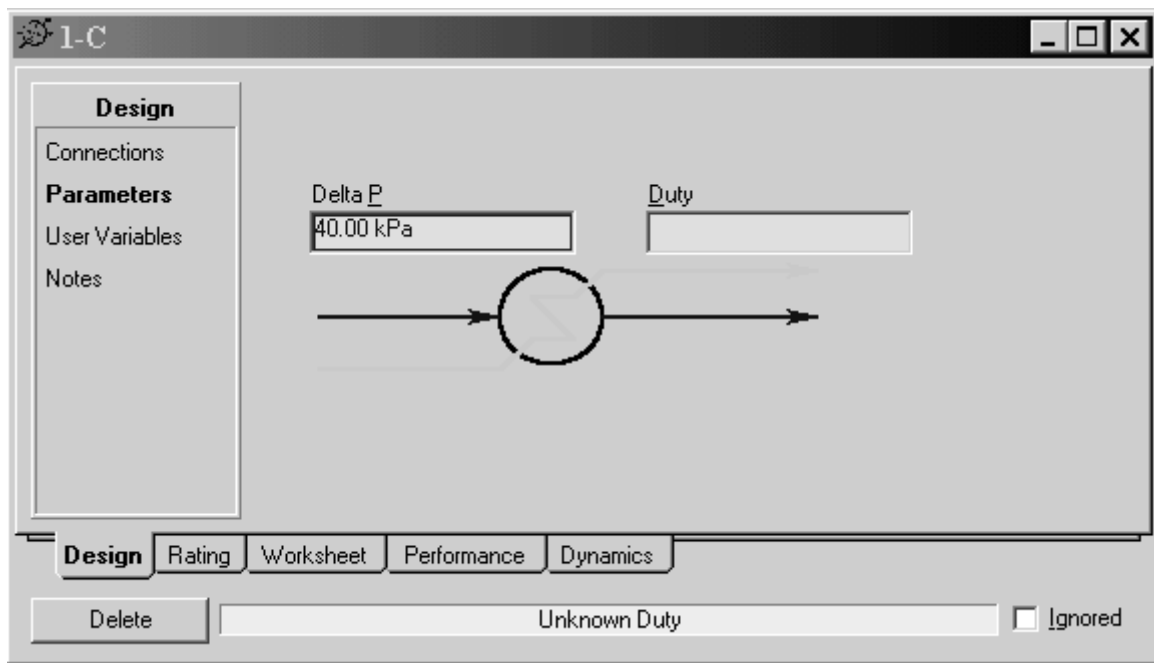


Рис. А.15. Визначення параметрів холодильника 1-С

Перейдемо в закладку *Worksheet-Conditions*, і в стовпці 4 задамо температуру 230 С, після чого схема буде розрахована (рис.А.16).

Додамо в модель ще один сепаратор (Separator). Введемо його параметри як на рис. А.17.

Перейдемо в закладку *Rating* і визначимо об'єм сепаратора: *Volume* – 80 m³.

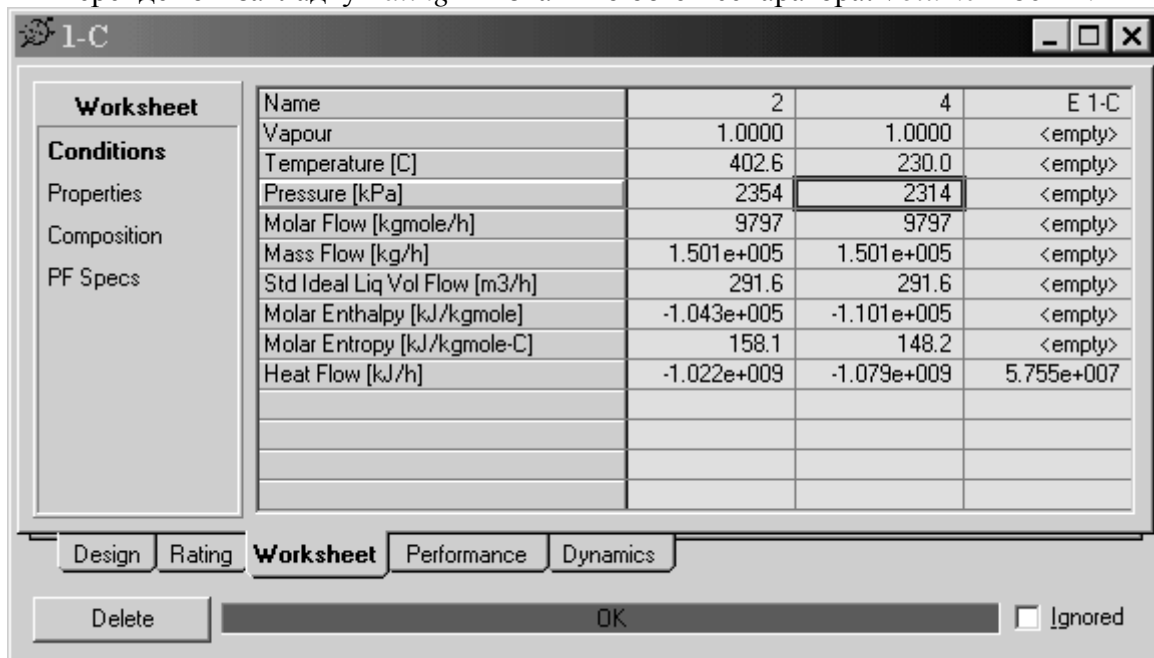


Рис. А.16. Результати рішення 1-С

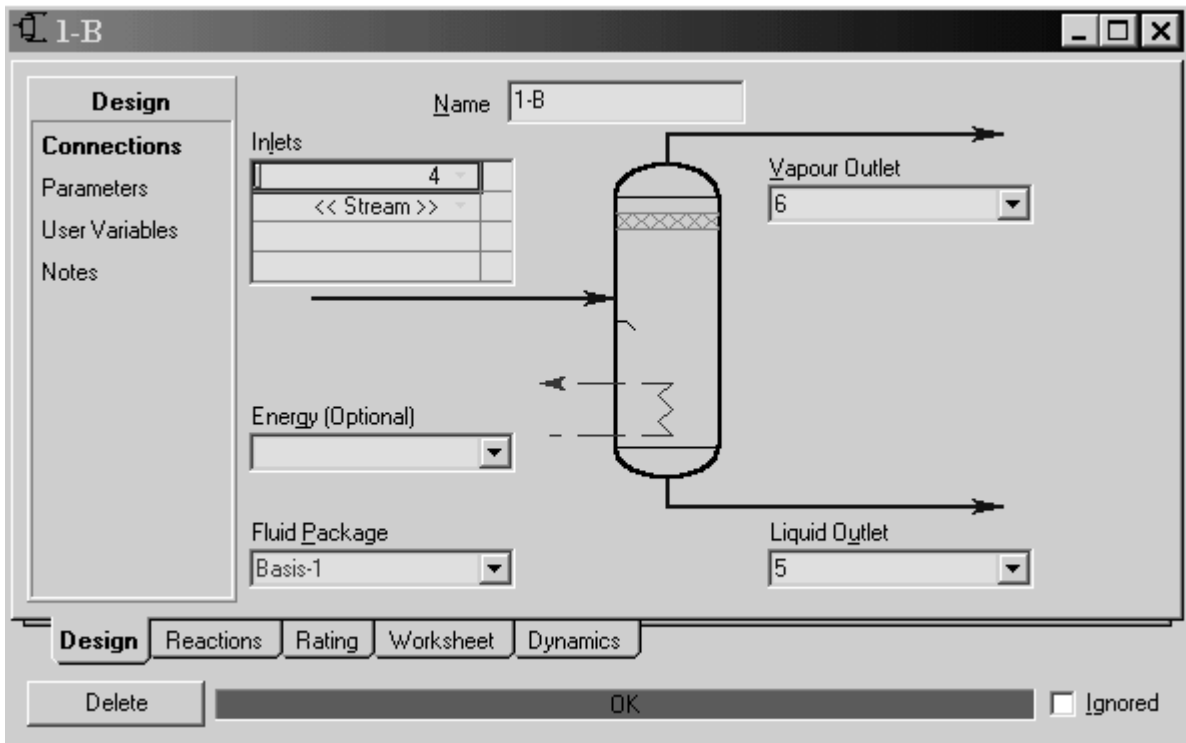


Рис. А.17. Основні параметри сепаратора 1-В

Перейдемо до закладки *Reactions*. У списку *Reaction Set* виберемо *Set-1*. Схема буде розрахована. У даному випадку сепаратор спрацював як реактор. Результати розрахунків можна побачити на закладці *Worksheet-Conditions* (рис. А.18) і *Worksheet-Composition* (рис. А.19). Остаточню модель виглядає як на рис.А.20.

1-B

Worksheet		4	5	6
Conditions	Name	4	5	6
	Vapour	1.0000	0.0000	1.0000
Properties	Temperature [C]	230.0	242.2	242.2
	Pressure [kPa]	2314	2314	2314
Composition	Molar Flow [kgmole/h]	9797	0.0000	9797
	Mass Flow [kg/h]	1.501e+005	0.0000	1.501e+005
PF Specs	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	291.6	0.0000	294.5
	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-1.101e+005	-2.665e+005	-1.101e+005
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	148.2	99.33	148.4
	Heat Flow [kJ/h]	-1.079e+009	0.0000	-1.079e+009

Design Reactions Rating **Worksheet** Dynamics

Delete OK Ignored

Рис. А.18. Результати розрахунку реактора 1-B

1-B

Worksheet		4	5	6
Conditions	H2O	0.2764	0.9930	0.2663
	Nitrogen	0.1270	0.0005	0.1270
Properties	Argon	0.0015	0.0000	0.0015
	Hydrogen	0.4564	0.0034	0.4666
Composition	Methane	0.0029	0.0000	0.0029
	CO	0.0134	0.0000	0.0032
	CO2	0.1224	0.0030	0.1325
	H2S	0.0000	0.0000	0.0000

Design Reactions Rating **Worksheet** Dynamics

Delete OK Ignored

Рис. А.19. Результати розрахунку реактора 1-У (склади потоків)

Отриману модель можна використовувати для проведення різних видів розрахунку, зв'язаних, наприклад, зі зміною режиму, зміною складу, зміною температури вхідного потоку і т.д.

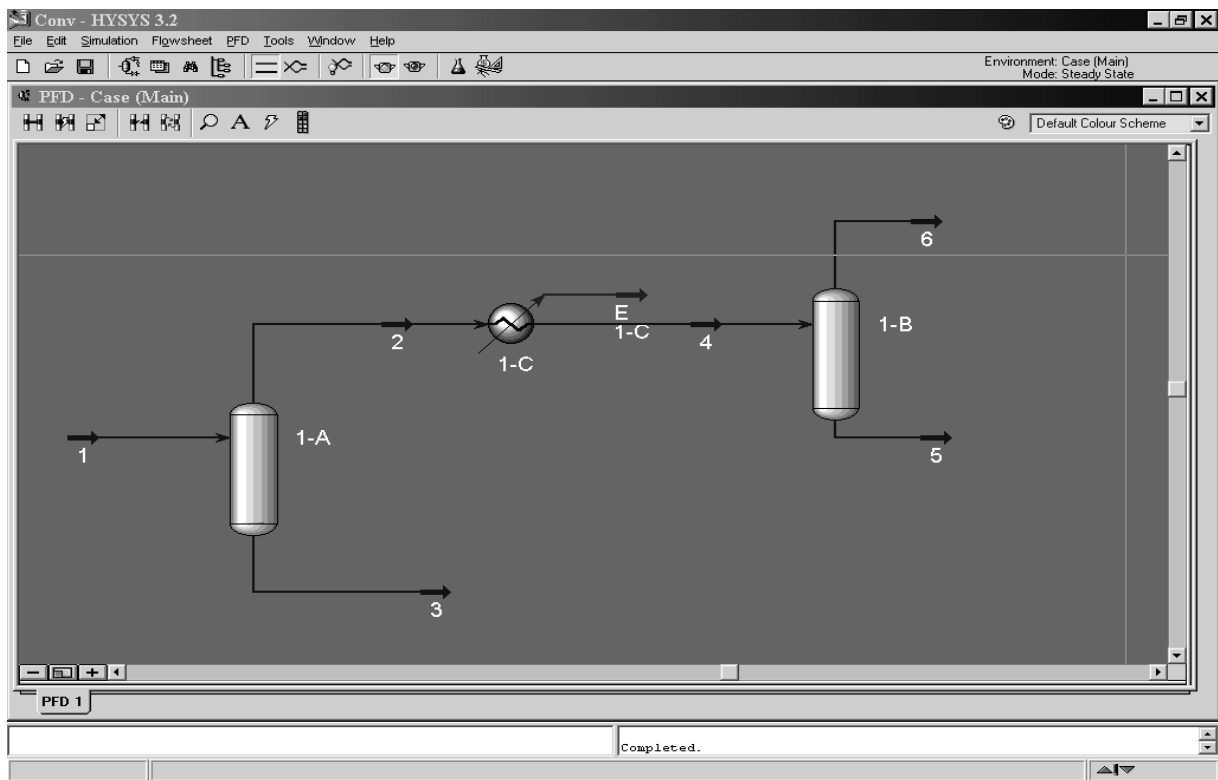


Рис А.20. Остаточний вигляд моделі

Додаток Б

Приклади рішення технологічних задач із використанням програми Aspen Plus

Б.1. Моделювання підсистеми теплообмінний апарат – випарник

В ХТС поступає потік наступного складу: 40 кмоль/год метану (CH_4), 30 кмоль/год етану (C_2H_6), 20 кмоль/год пропану (C_3H_8) та 10 кмоль/год н-бутану ($\text{C}_4\text{H}_{10-1}$). Потік має температуру 20°C і тиск 2 бар (1 бар = 10^5 Па).

Потік охолоджується в теплообмінному апараті до -80°C і потім розділяється на пар та рідину в випарнику (Flash) (рис. Б.1). З цієї причини в теплообмінному апараті тиск падає на 0,5 бар. В випарнику тиск падає ще на 0,5 бар.

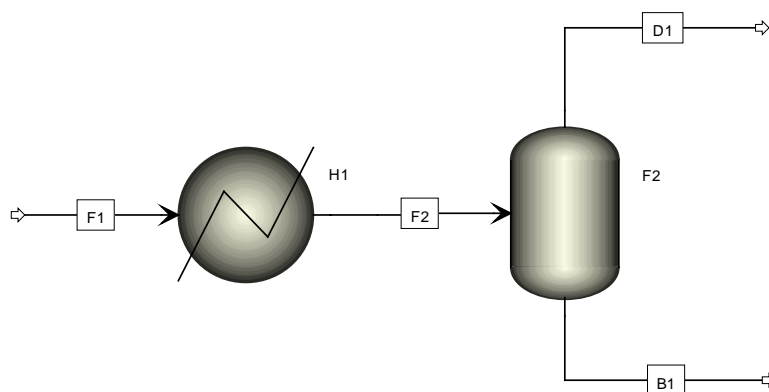


Рис. Б.1. Схема підсистеми теплообмінний апарат – випарник

Для побудови схеми зображеної на рис. Б.1 використаємо блоки *FEED* (вхідні матеріальні потоки), *HEATER* (теплообмінник *H1*), *FLASH2* (випарник *F2*). Послідовно заповнюючи всі необхідні для розрахунку форми виберемо зокрема в меню **Properties->Specifications** метод UNIFAC – як модель для термодинамічних розрахунків. Вибираючи послідовно **Blocks->H1** та **Blocks->F2** задаємо в них властивості цих апаратів: зниження тиску на 0,5 бар (зменшення тиску може бути задано введенням відповідного цьому зниженню від'ємного значення тиску) та температуру -80°C . Для випарника вибирається адиабатичний режим роботи.

Послідовність введення даних наступна:

1. В меню **Setup->Specification** вибирається назва проекту, тип аналізу (ХТС чи аналіз властивостей компонентів), система розмірностей даних які вводяться користувачем і розмірності результатів (англійська, метрична чи СІ).
2. В меню **Components->Specification** треба задати речовини які будуть фігурувати в ХТС. Для введення певної речовини треба або задати в полі Component *ID* формулу речовини або скористатися пошуком речовини в базі. Ця форма показана на рис. Б.2.

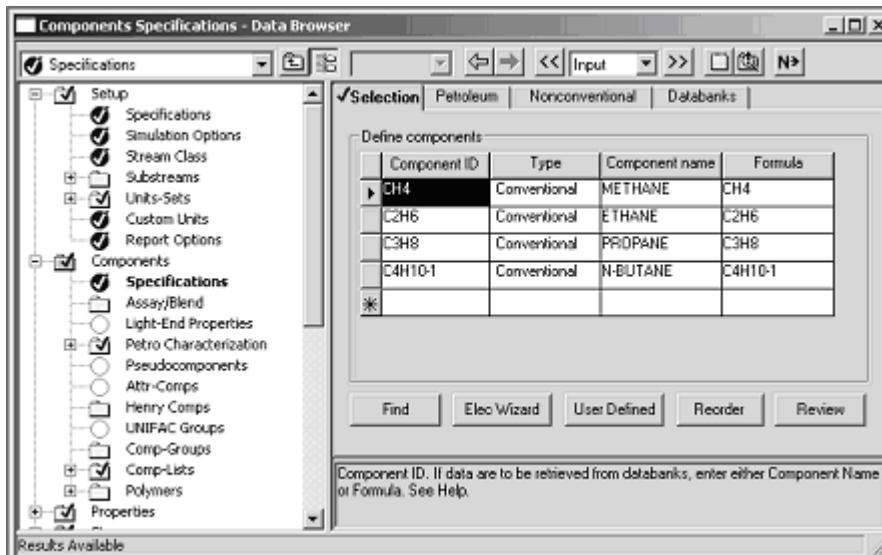


Рис. Б.2. Форма для введення компонентів

3. В меню **Properties->Specification** треба задати метод моделювання та його параметри.
4. В меню **Streams->(Назва потоку)->Input** треба задати вхідні потоки, їх температуру, тиск і склад. Форма для їх введення наведена на рис. Б.3.

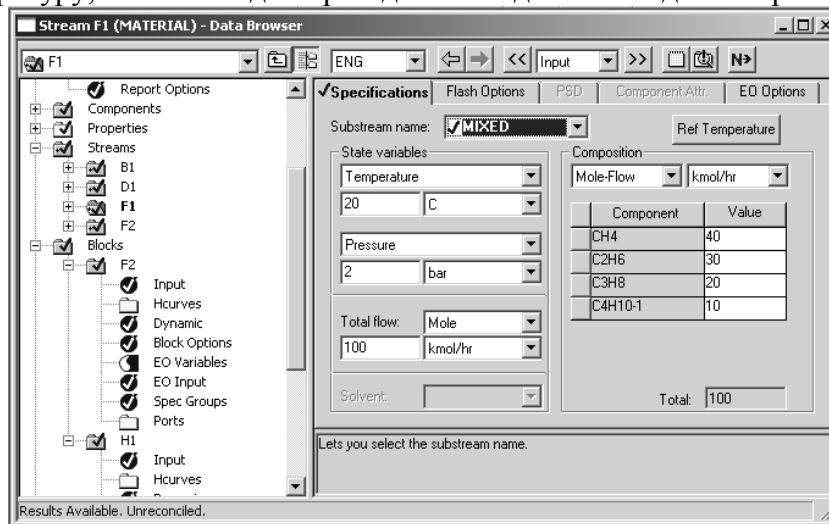


Рис. Б.3. Форма для введення поточкових даних

5. В меню **Blocks->(Назва апарату)->Input** необхідно ввести параметри, які стосуються роботи даного апарату. Такі параметри для кожного типу апарату свої. Так наприклад для даного типу теплообмінника необхідно ввести температуру і падіння тиску, як показано на рис. Б.4.

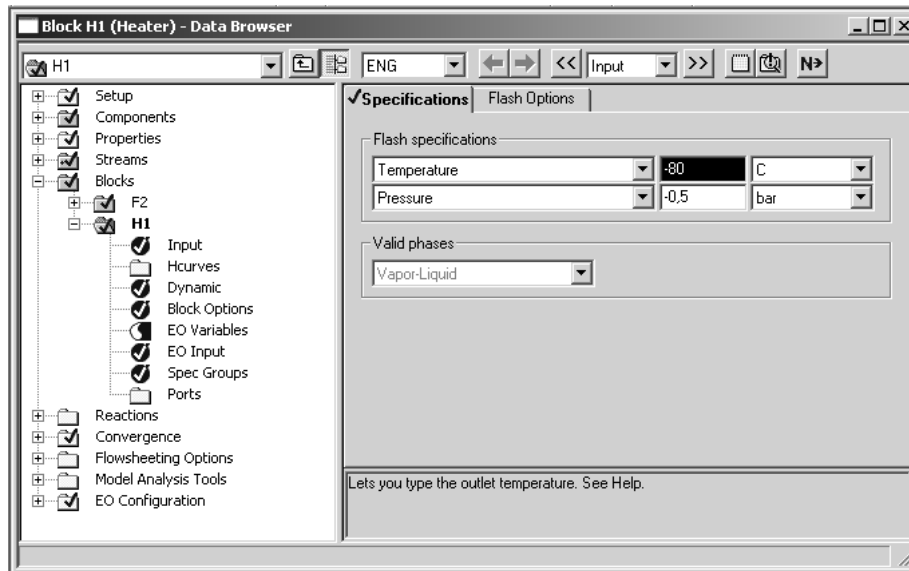




Рис. Б.4. Форма для введення параметрів апаратів

6. Після введення всіх необхідних даних (переключатись між вікнами для введення даних можна за допомогою кнопки ) стає активною кнопка запуску моделювання. Натиснемо її й почнемо моделювання. Після проведення розрахунків стає активною кнопка  на панелі інструментів. Натискаючи її викликаємо на екран форму з результатами моделювання (рис. Б.5). Результати виділено в окремі групи по потокам і апаратам. Вибираючи результат для якогось із апаратів отримуємо на екрані форму, таку як показано на рис. Бб.

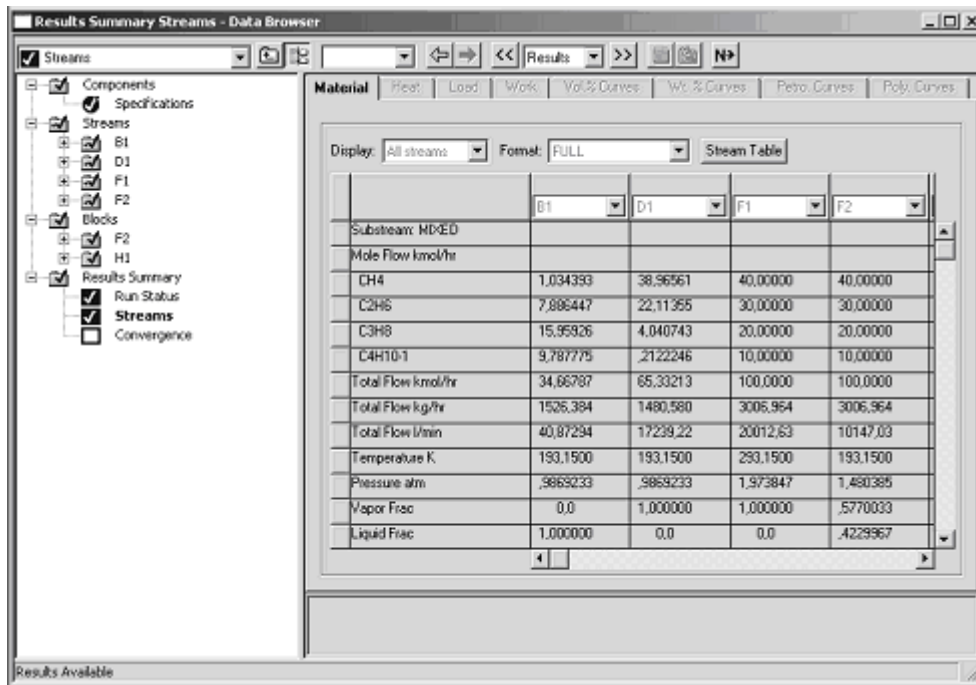


Рис. Б.5. Форма з результатами моделювання по потокам

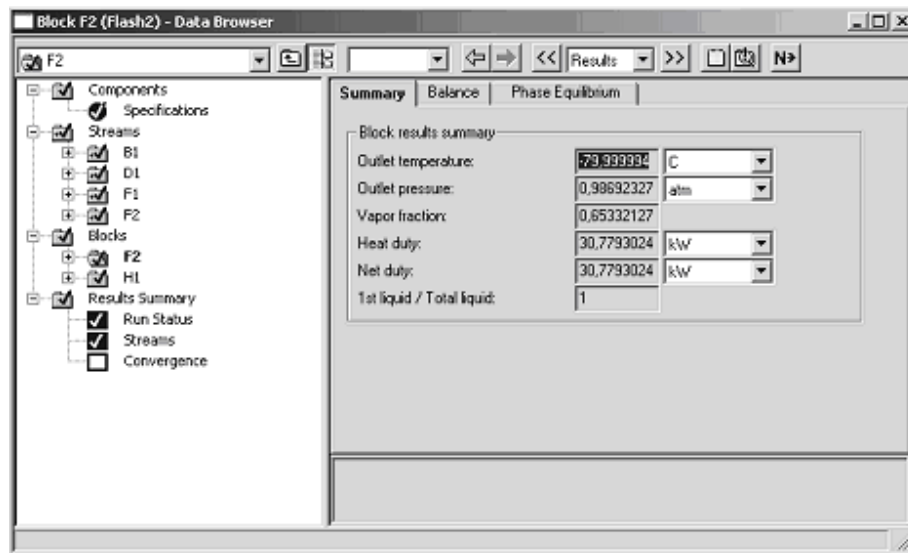


Рис. Б.6. Форма з результатами моделювання окремого апарату

Існує також можливість виведення даних з форми на робочий лист. Це можна здійснити за допомогою кнопки **Stream Table** в формі яка приведена на рис. Б.5.

Б.2. Вивчення залежності тиску водяної пари від температури

В Aspen plus існує декілька режимів роботи, один з яких Flowsheet – був розглянутий вище; якщо необхідно визначити властивості речовини чи суміші і при цьому не потрібна технологічна схема то для такого аналізу використовуються інші режими роботи. Задаються режими роботи або при створенні нового файлу проекту або в меню: **Setup->Specification->Run Type**. Можна вибрати такі режими роботи: *Assay Data Analysis, Data regression, Flowsheet, Properties Plus, Property Analysis, Property Estimation*. При стандартному запуску Aspen plus використовується тип *Flowsheet*.

Завдання аналізу:

- побудувати діаграму для водяного пара P (тиск) як функція від T (температури) при зміні останньої від 50 до 300°C з кроком 10;
- визначити які температури відповідають тискам 1 бар, 5 бар, 20 бар (зворотна задача);
- побудувати діаграму кипіння T/x_y для системи речовин етанол/вода, пропанол/вода;
- побудувати трикутну діаграму для системи речовин: етанол/пропанол/вода.

Для виконання аналізу виконаємо такі кроки:

1. Виберемо в меню **Setup->Specification->Run Type** режим *Property Analysis*.
2. Задамо в **Components->Specification** компоненти суміші яку будемо аналізувати: вода (H₂O), етанол (C₂H₆O_{2.2}) і пропанол (C₃H₈O_{.1}).
3. В меню **Properties->Specification** виберемо метод UNIFAC.
4. а) Виберемо **Properties->Analysis->New** і задамо ім'я і тип аналізу (можна вибрати між *Generic, PTEvelope, Residue*) *Generic* – загальний тип аналізу.
б) На закладці **System** задаємо значення потоку компонентів 1кмоль/год для води (інші компоненти в цьому аналізі не присутні).
в) На закладці **Variable** задаємо змінну яку нам треба варіювати, потім виділяємо її і натискаємо кнопку “*Range List*”, де задаємо початкове і кінцеве значення температури, а також крок, як показано на рис. Б.7.

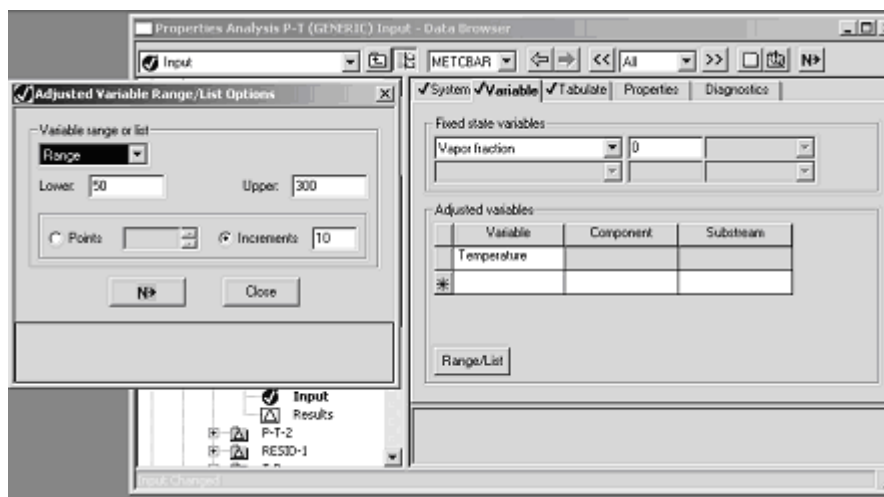


Рис. Б.7. Введення параметрів змінної величини (температури)

г) В закладці **Tabulate** виберемо таблицю аналізу VLE. При використанні цієї таблиці буде розраховано густину, ентальпію та тиск вибраного компонента при значеннях змінної величини яка задається на попередньому кроці.

д) Побудуємо графік залежності тиску пари води від температури. Для цього після закінчення обчислень в таблиці результатів виділимо стовпчик зі значеннями температури і в меню “Plot” виберемо “X-Axis variable” – після цього температура буде прив’язана до змінної X на графіці, аналогічним шляхом виберемо стовпець зі значеннями тиску відповідного даній температурі і виберемо в меню “Plot” “Y-Axis variable”. Після цього виберемо пункти меню *Plot\Show plot*. Результат зображено на рис. Б.8.

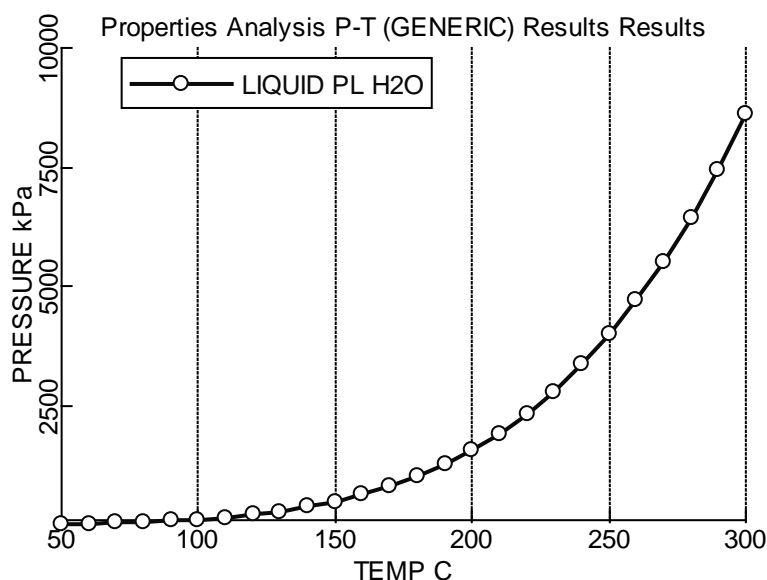


Рис. Б.8. Залежність тиску водної пари від температури

Задачу описану вище можна розв’язати з використанням іншої таблиці аналізу, наприклад визначеної користувачем. Для цього треба вибрати **Properties->Prop Set->New** задати нове ім’я таблиці та перелік властивостей які повинні в цій таблиці обраховуватись. Тоді на кроці г) нам треба буде вибрати не таблицю **VLE**, а ту яка була створена нами.

5. Для розв’язання зворотної задачі до пункту 4 створимо таблицю аналізу з назвою P_s-T-P шляхом вибору **Properties->Prop Set->New** в якій виберемо температуру як властивість речовини яку необхідно знайти при даному значенні тиску. Далі виберемо цю таблицю аналізу в меню **Properties->Analysis->Tabulate**. Оскільки значення тисків, при яких нам треба розраховувати температуру, не можна зобразити у вигляді послідовності з певним кроком, то у вікні, яке зображено на рис. Б.9, виберемо не „Range”, а „List”, і задамо всі значення тиску, при яких треба визначити температуру. При такому введенні розмірність тиску буде відповідати обраній системі одиниць в формі **Setup->Specification->Global** (для метричної системи це бар).

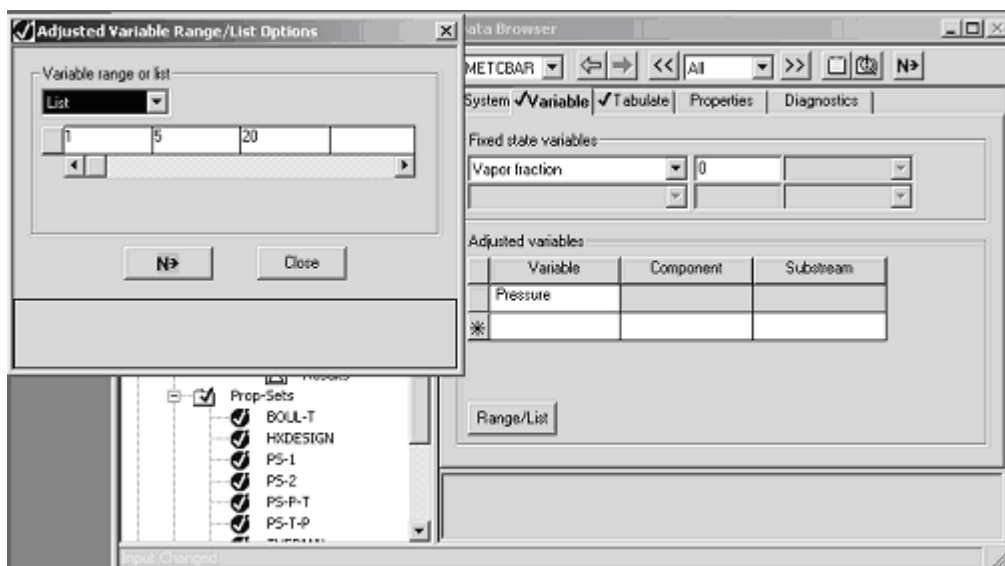


Рис. Б.9. Введення окремих значень змінної величини (тиску)

6. Для побудови діаграм кипіння T/x_y треба послідовно вибрати в головному меню: **Tools->Analysis->Property->Binary**. Далі відкриється вікно яке зображено на рис. Б.10. В ньому вводяться компоненти суміші, тип аналізу та інші необхідні дані.

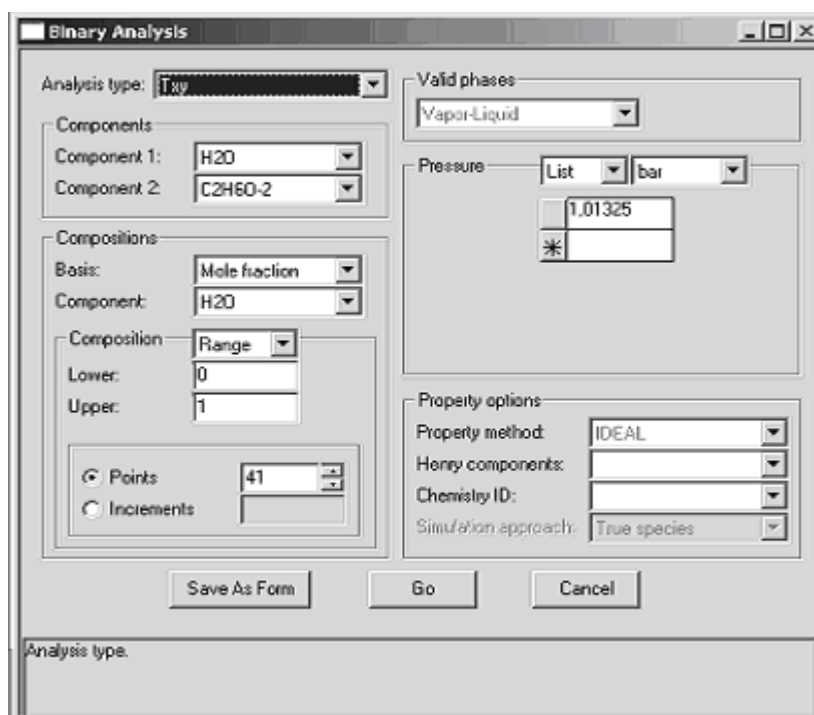


Рис. Б.10. Побудова діаграми кипіння

Результати побудови діаграм для суміші вода/етанол і вода/пропанол приведені відповідно на рис. Б.11 і рис. Б.12.

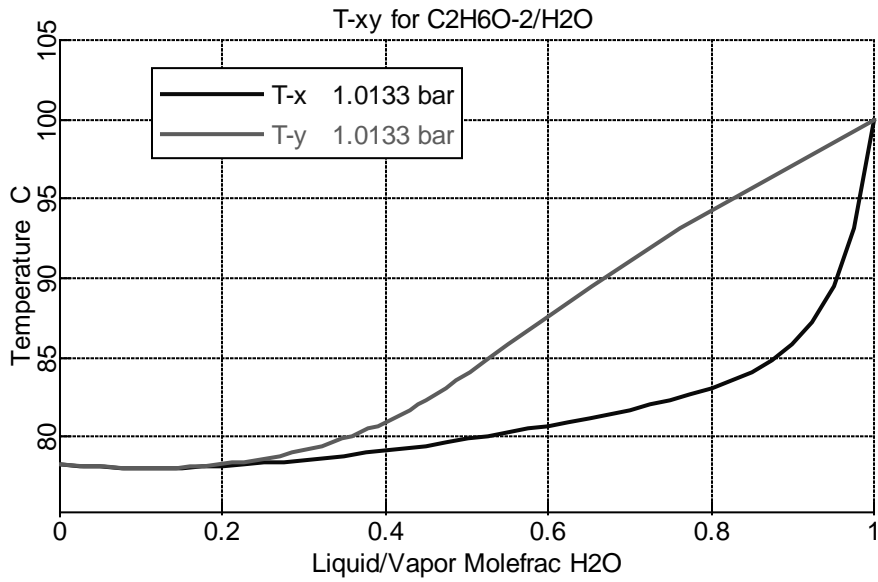


Рис. Б.11. Діаграма кипіння для суміші вода/етанол

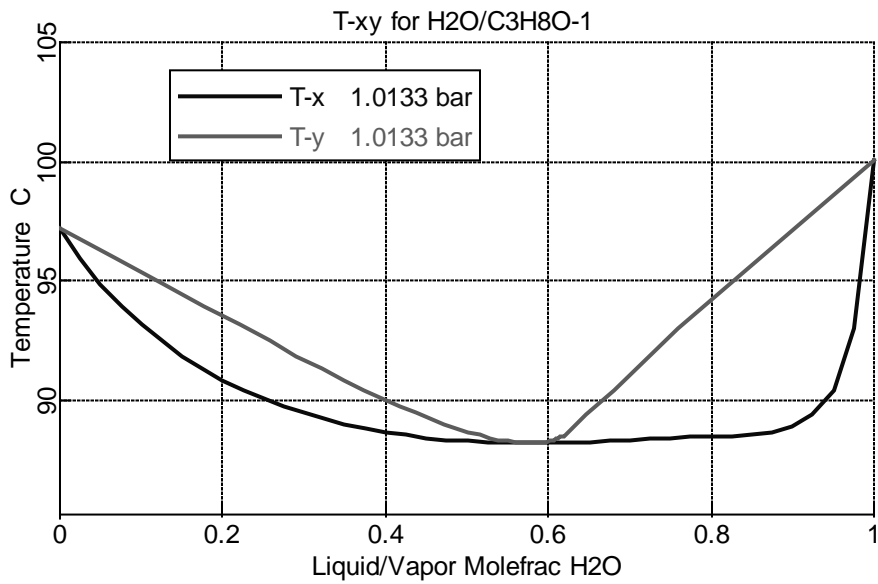


Рис. Б.12. Діаграма кипіння для суміші вода/пропанол

Як бачимо з рис. Б.12 суміш вода/пропанол має точку азеотропа при приблизній концентрації H₂O 0,58.

7. Для побудови трикутної діаграми виберемо: *Tools->Analysis->Property->Ternary*
Результат приведений нижче на рис. Б.13.

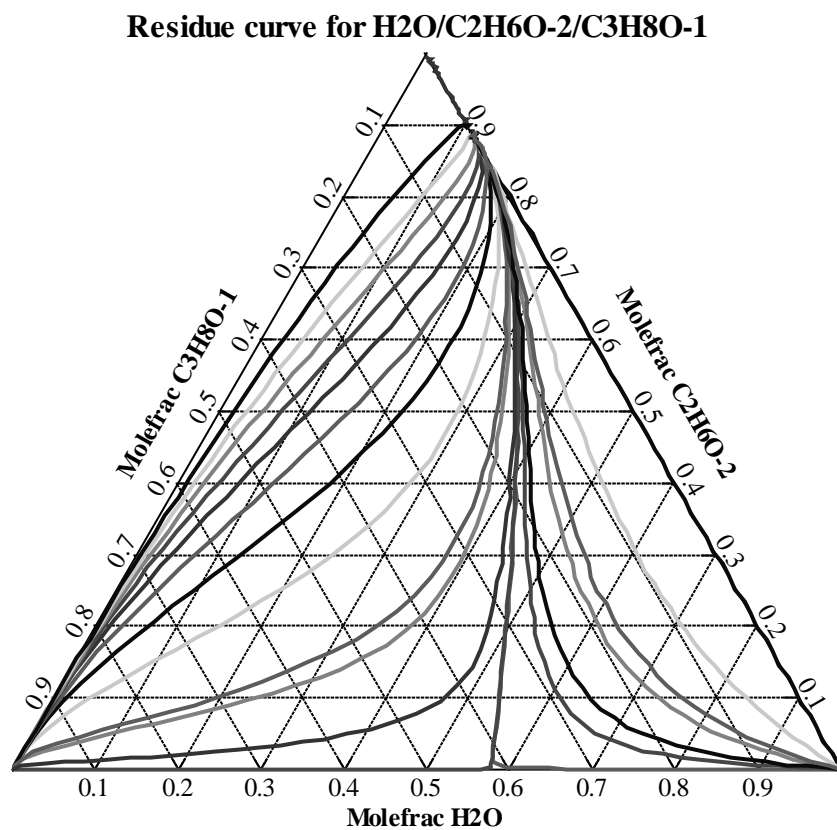


Рис. Б.13. Трикутна діаграма для суміші вода/етанол/пропанол

Б3. Визначення властивостей заданої суміші

Необхідно знайти технологічну схему для отримання 100кг/год мірабілітового розчину. Визначити питому теплоємність, густину та в'язкість цього розчину при наступних температурах: 0°C, 10°C, 17,5°C, 32,4°C, 49°C. Склад суміші: Na₂SO₄ – 1,97%, KCl – 7,92%, NaCl – 19,53%, H₂O – 70,58%.

Використовуючи блоки *FEED* та *MIXER* складемо схему отримання розчину, як показано на рис. Б.14.

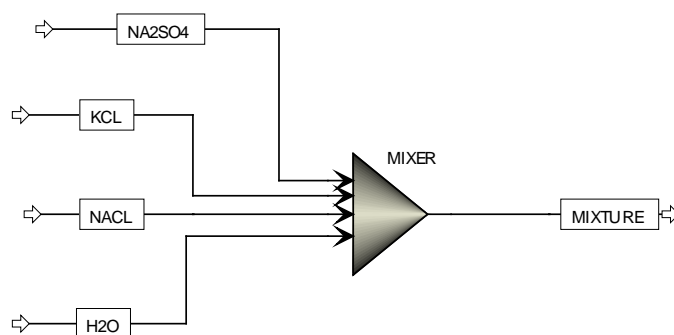


Рис. Б.14. Модель схеми отримання мірабілітового розчину

Введемо дані щодо компонентів, потоків та змішувача. Далі шляхом вибору *Properties->Prop Set->New* створимо таблицю аналізу з ім'ям *ANALIS* рис. Б.15.

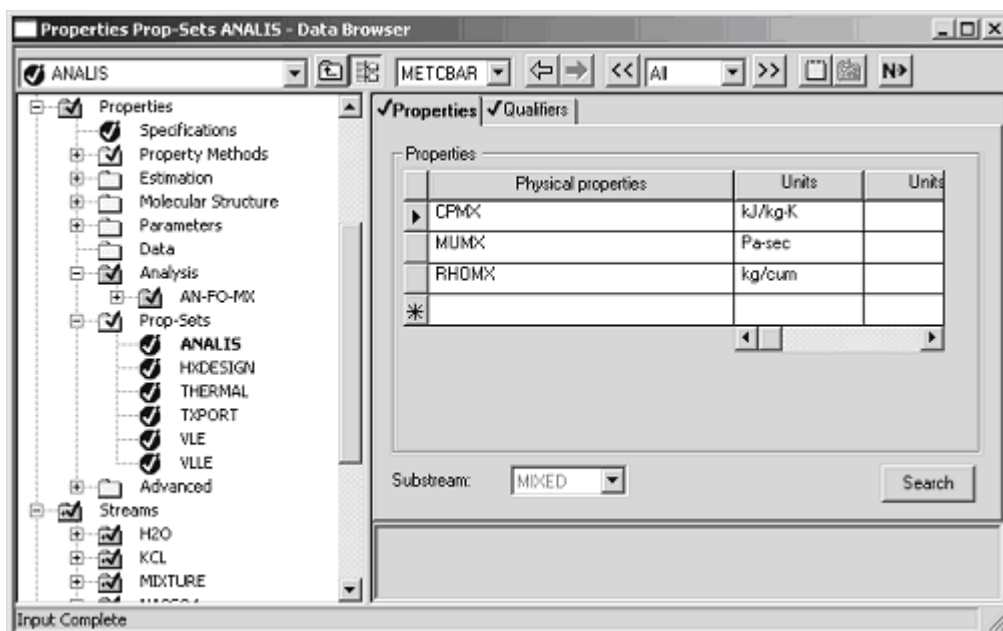


Рис. Б.15. Створення таблиці аналізу

Як бачимо справа від змінних можна вибрати одиниці в яких вони будуть відображатись після підрахунку. Далі за допомогою *Properties->Analysis->New*

створюємо аналіз типу *Generic*, як було описано в Розділі 2 пункті 5 створюємо змінну типу *Temperature* і задаємо їй список значень. В закладці *Properties->Analysis->Tabulate* вибираємо створену нами таблицю аналізу *Analisis*. Результати розрахунків приведені в таблиці Б.1.

Таблиця Б.1.

Теплоємність, в'язкість та густина мірабілітової суміші при різних значеннях температури

<i>TEMP</i>	<i>LIQUID CPMX</i>	<i>LIQUID MUMX</i>	<i>LIQUID RHOMX</i>
C	kJ/kg-K	Pa-sec	kg/cum
0	2,834798	0,00325984	1125,011
10	2,875738	0,00248067	1121,233
17,5	2,908355	0,00205482	1118,393
32,4	2,978196	0,00146697	1112,731
49	3,064406	0,00106003	1106,394

Б4. Визначення точки роси для багатокомпонентної суміші

Визначити точку роси для багатокомпонентної суміші. Склад суміші представлений в табл. Б.2.

Таблиця Б2.

Склад суміші

Назва речовини	Формула*	Витрати (кг/год)
Фуран	C_4H_4O	709,34
Фурфурол	$C_5H_4O_2$	268,5
Фурфуриловий спирт	$C_5H_6O_2$	75,84
Тетрагідрофурфуриловий спирт	$C_5H_{10}O_2$	14,74
Тетрагідрофуран	C_4H_8O	6,32
Вода	H_2O	7,23
Вуглекислий газ	CO_2	4,44
Окис вуглецю	CO	278,72
Водень	H_2	26,16

* - формула вказується у вигляді, в якому вона зустрічається в Aspen plus.

Розрахувати:

1. По компонентні витрати газової та рідкої фази при температурах нижче точки роси з інтервалом $10^\circ C$ до $100^\circ C$.
2. Виконати аналогічний розрахунок для газової фази потоку, отриманого при $t=10^\circ C$, тиску 14 атм і температурі $200^\circ C$.

Технологічна схема для розв'язання задачі має вигляд (рис. Б.16).

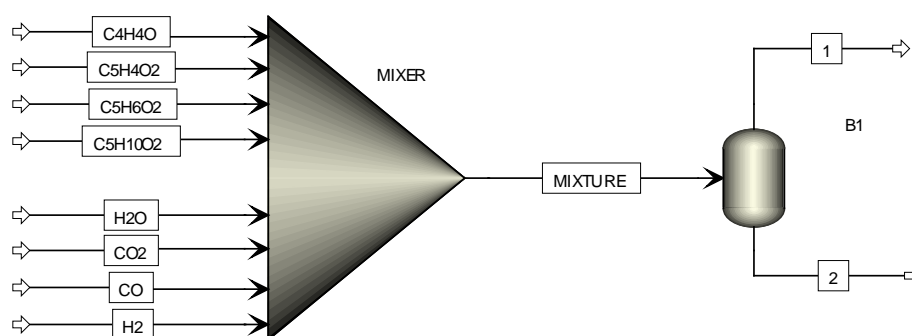


Рис. Б.16. Схема в Aspen Plus для моделювання

Потоки складових речовин суміші поступають у змішувач і далі при такій же температурі розділяються на газову і рідку фази.

Для виконання розрахунку знайдемо за допомогою виклику в головному меню **Tools->Analysis->Stream...->Bubble/Dew..** точку роси для потоку *Mixture* (для цього виділимо цей потік а потім скористаємось вище наведеною командою). Отримаємо

діаграму, зображену на рис. Б.17. Далі будемо варіювати температуру потоку від 10°C до точки роси при 100°C.

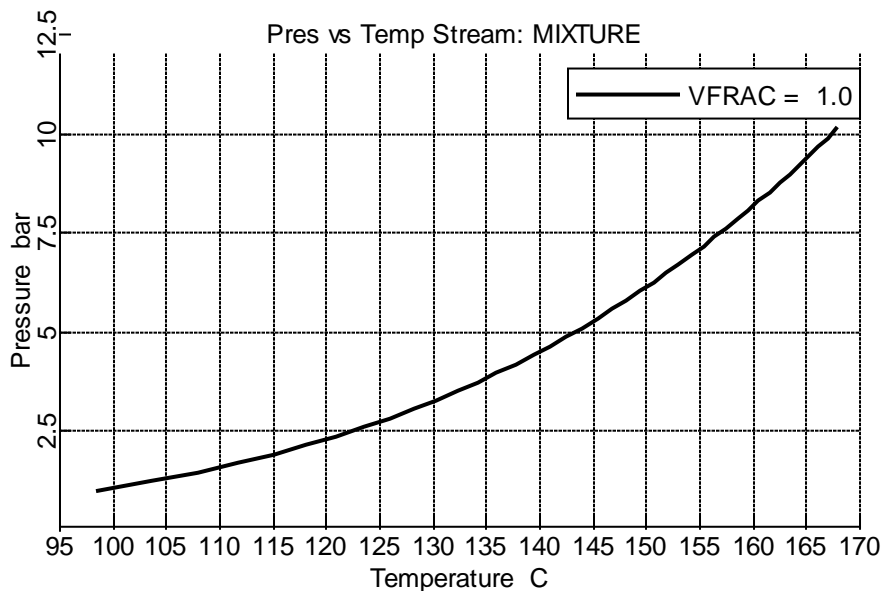


Рис. Б.17. Діаграма залежності тиску від температури при температурі вищій від точки роси

Aspen Plus надає можливість користувачу створювати свої змінні. Ці змінні стосуються блоку чи взагалі процесу і слідкувати за ними відповідно до зміни якоїсь іншої змінної, загальної для процесу. Таким чином відбувається аналіз змінних на чутливість. Далі набір таких змінних можна вивести в спеціальну таблицю. Для створення такого типу аналізу в меню треба вибрати **Model Analysis Tools->Sensitivity->New**, і ввести назву такого аналізу, наприклад S-1. Далі на закладці **Define** аналізу S-1 треба створити змінні використовуючи кнопку **New...** Процес створення змінних відображений на рис. Б.18.

Можна вибрати як певний параметр потоку, так і параметр блоку. В нашому випадку ми створюємо змінні потоку, для кожного компонента потоку по дві змінні: одну для величини мольних витрат у паровій фазі і одну для величини мольних витрат у рідкій фазі. Рідкій фазі відповідає потік 2, а паровій – потік 1.

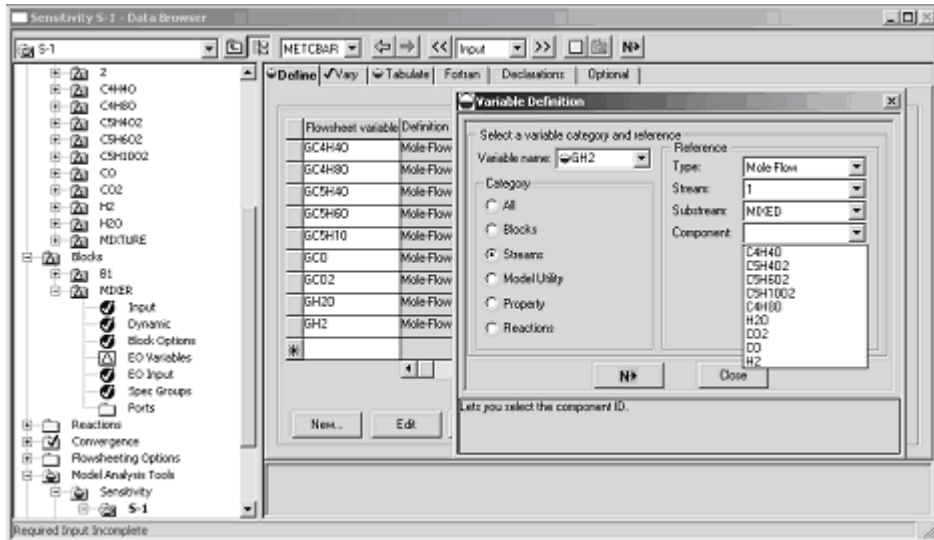


Рис. Б.18. Створення змінних для аналізу S-1

Далі на закладці *Vary* вибирається параметр, від зміни якого будуть залежати всі наші створені на закладці *Define* змінні. У нашому випадку це температура для блоку розділення *Flash2*, який має ідентифікатор B1 на схемі на рис.Б.16. На закладці *Vary* також задаються початкове і кінцеве значення а також крок. Можна задати якийсь певний набір значень за допомогою *List of values*. Ця форма показана на рис. Б.19.

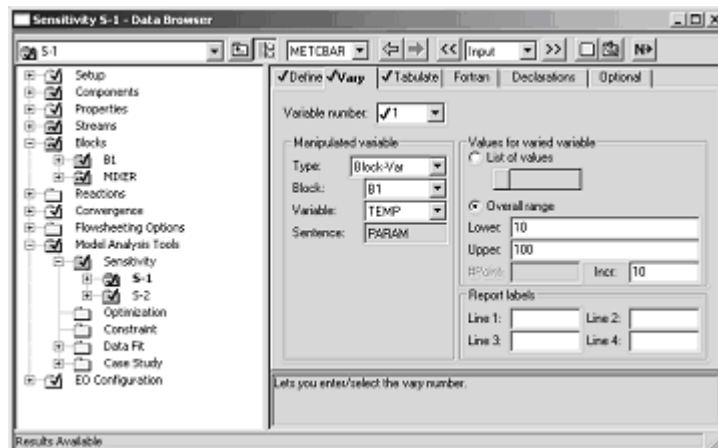


Рис. Б.19. Форма *Vary* для створення індексованої змінної

Далі необхідно сформувати таблицю, в якій будуть відображатися результати нашого аналізу. Для цього на закладці *Tabulate* відповідно до рис. Б.20 ми задаємо для кожної раніше створеної змінної певну колонку і навпроти значення колонки вводимо ім'я змінної. Зручно це робити, скориставшись контекстним меню, в якому треба вибрати *Variable List* (контекстне меню треба вибрати в полі де вводиться ім'я змінної). Відкриється вікно як показано на рис. Б.20 і з нього можна мишкою перетягнути всі необхідні змінні у відповідні їм поля.

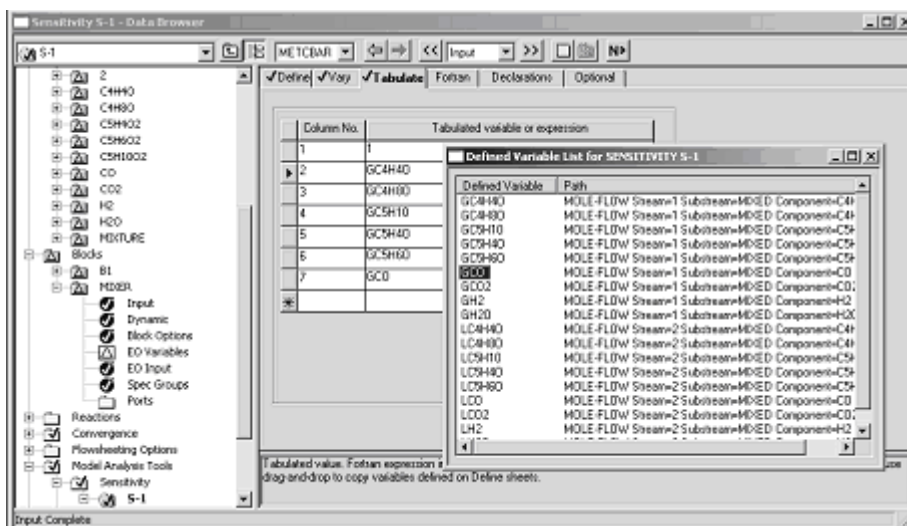


Рис. Б.20. Створення таблиці змінних

Після цього створення аналізу закінчено і можна запускати моделювання.

При досягненні сумішню температури в 100°C витрати в рідкій фазі дорівнюють 0, тобто вся суміш переходить у парову фазу.

Для того, щоб провести аналогічний аналіз для газової фази відповідно до завдання 2, виконуємо аналогічні кроки, за винятком того що на закладці *Vary* створюємо ще одну змінну для тиску в блоці B1, якій в *Variable List* задаємо значення 14 бар. В результаті були отримані покомпонентні витрати для парової фази при тиску 14 бар і зміні температури від 10 до 200°C , відповідно до завдання 2.

Б5. Моделювання процесу ректифікації

При моделюванні процесу ректифікації зручно використовувати модель *RADFRAC*. Розрахунок проводиться на основі принципу теоретичного ступеня розділення: на кожній тарілці досягається повна рівновага. З рівнянь для балансу і рівноваги для кожної тарілки отримуємо нелінійну систему рівнянь. Для розв'язання системи рівнянь використовується метод Ньютона-Рафсона. Геометрія колони (кількість числа тарілок і тарілка живлення) повинна встановлюватися перед моделюванням. Aspen Plus не є програмою для синтезу процесу розділення, а може використовуватися тільки для аналізу готової схеми.

Завдання на моделювання

Потік $F1$ розділяється ректифікацією в блоці *RECTIF1(RADFRAC)* на дистилат $D1$ у вигляді пари і кубову рідину $B1$. Витрата вхідного потоку 1 моль/с. Вхідний потік поступає у вигляді киплячої рідини при тиску 1,5 бар і складається з 50% мольних води і 50% метанолу (CH_4O). Колона складається з 15 теоретичних ступенів розділення, відношення витрати дистилату до витрати вхідного потоку складає 0,5 при потужності нагріву кубу 50кВт. Вхідний потік подається на 7-у тарілку. Тиск дистилату складає 1,2 бар. Від конденсатора тиск зростає на 0,15 бар, тому на другій тарілці тиск буде складати 1,35 бар. На кожній наступній теоретичній тарілці тиск зростає на 0,01 бар.

Необхідно обчислити величину флегмового потоку і парового числа, а також побудувати графіки зміни температурного та концентраційного профілю по довжині колони. Ці ж результати треба представити для ситуації коли тарілка живлення: 1) четверта; 2) одинадцята; 3) сьома і немає перепаду тиску в колонні (тиск всюди 1 атм).

Моделювання

Для моделі ректифікаційної колони використаємо модель *RADFRAC* та метод моделювання *UNIFAC*.

Модель буде мати вигляд як показано на рис. Б.21.

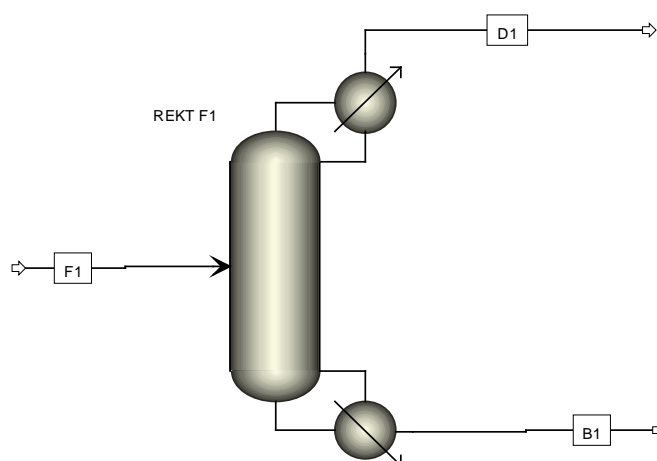


Рис. Б.21. Модель ректифікаційної колони

На формі *Setup->Configuration* створеного блоку задамо відповідно до рис. Б.22 кількість тарілок – 15 (*Number of stages*), відношення витрати дистилату до витрати

вхідного потоку – 0,5 (*Distillate to feed ratio*), потужність нагріву кубу 50 kW (*Reboiler Duty*).

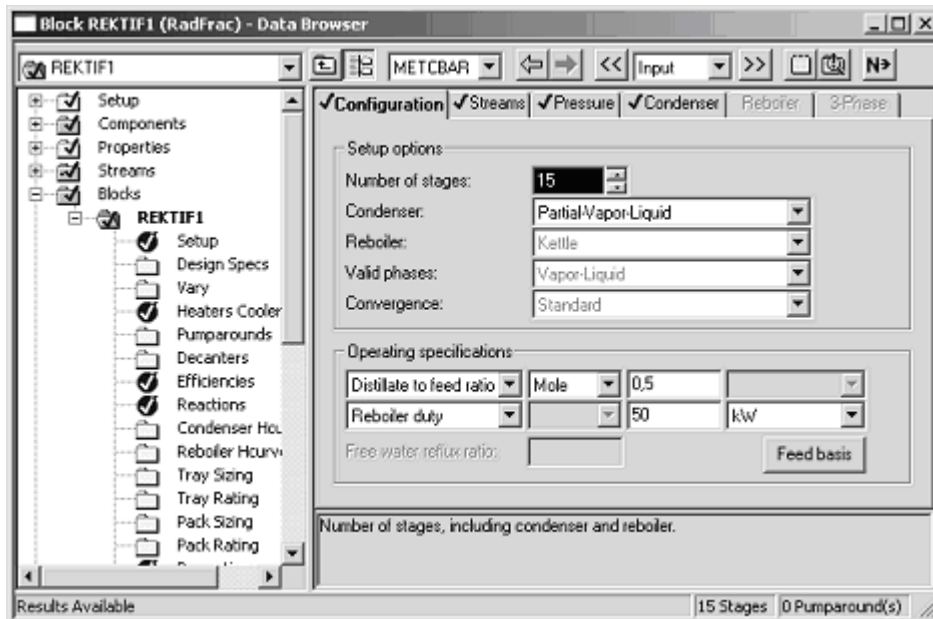


Рис. Б.22. Введення параметрів блоку RADFRAC

На закладці *Streams* задаємо тарілку живлення № 7 (*above stage*). На закладці *Pressure* задаємо профіль зміни тиску в колоні відповідно до рис. Б.23.

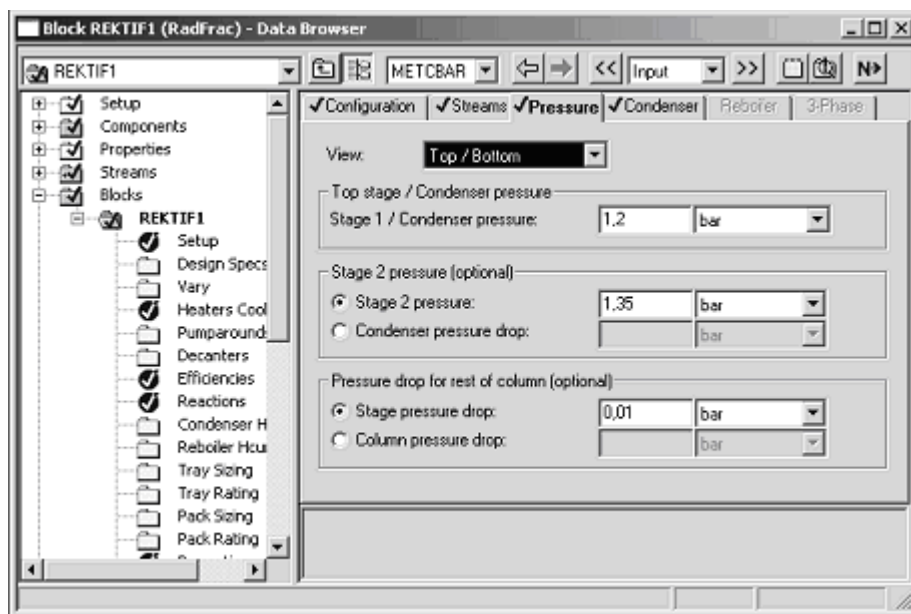


Рис. Б.23. Визначення профілю зміни тиску в колонні

Далі на закладці *Condenser* вводимо *Distillate vapour fraction* → *StdVol* рівним 1 (весь дистилат виділяється у вигляді пари). Після введення цих даних схема готова для розрахунків. Результати моделювання відображені на рис. Б.24.

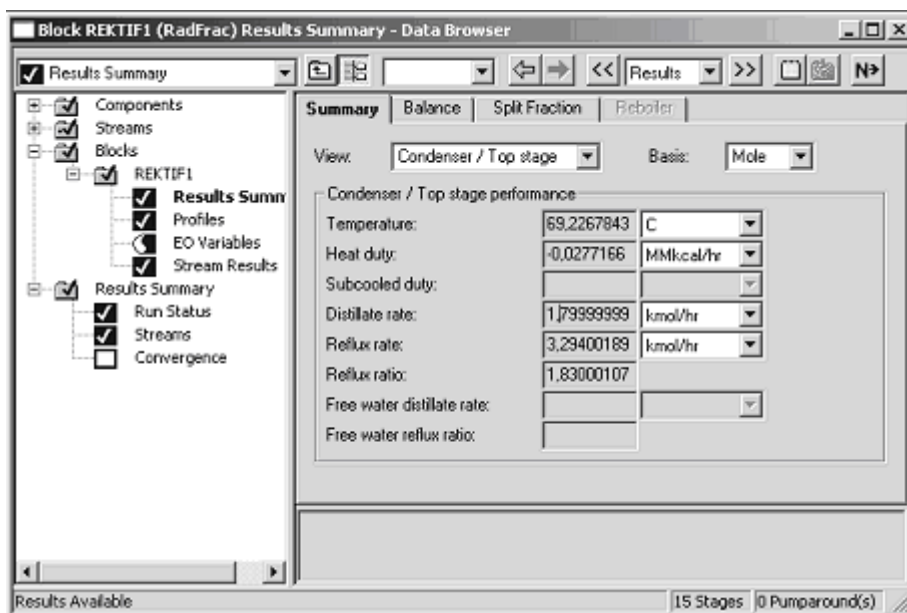


Рис. Б.24. Результати моделювання ректифікаційної колони

Як бачимо з рис. Б.24 величина флегмового потоку складає 3,294 кмоль/год, величина потоку дистилляту складає 1,799 кмоль/год. Температурний та тепловий профілі можна подивитись вибравши форму *Profiles* колони. Для побудови графіків профілів скористаємось командою *Plot Wizard* меню *Plot*. Для цього виділимо за допомогою мишки стовпчик з даними які будуть відігравати роль *X* і виберемо в меню *Plot->X axis variable* аналогічно зробимо для змінних які будуть виступати як *Y* координати на графіці. Отримаємо графіки, які зображені на рис. Б.25 (температурний профіль) і рис. Б.26 (концентраційний профіль).

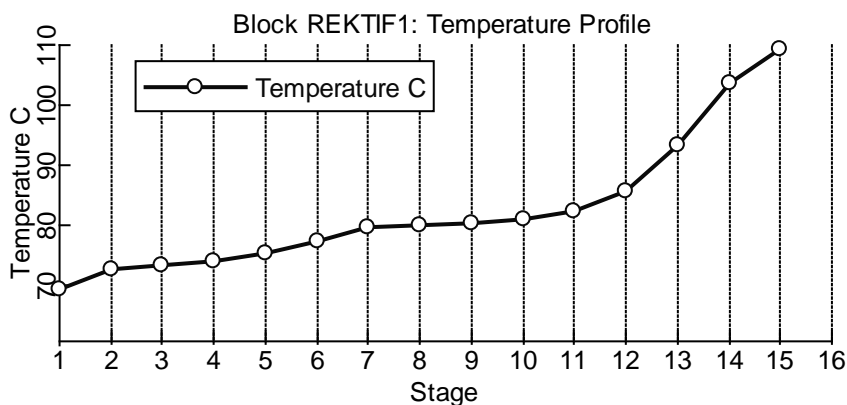


Рис. Б.25. Температурний профіль

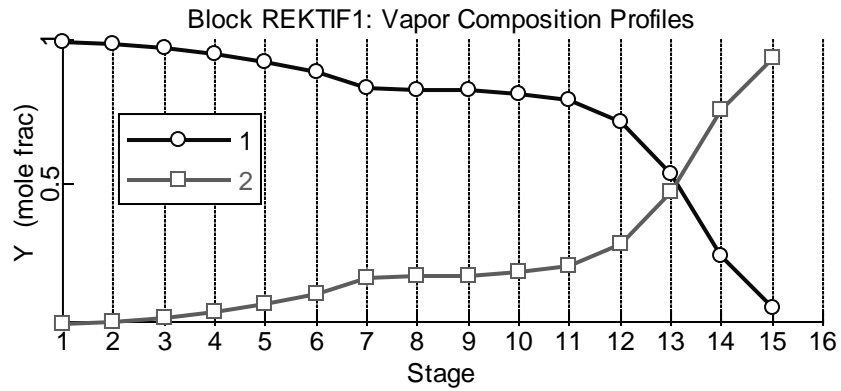


Рис. Б.26. Концентраційний профіль

Виконаємо розрахунки для інших вхідних даних представлених у завданні.

1) Тарілка живлення №4. Величина флегмового потоку: 3,25581616 кмоль/год. Величина потоку дистилату: 1,79999999 кмоль/год. Температурний і концентраційний профілі відображені на рис. Б.27 і рис. Б.28 відповідно.

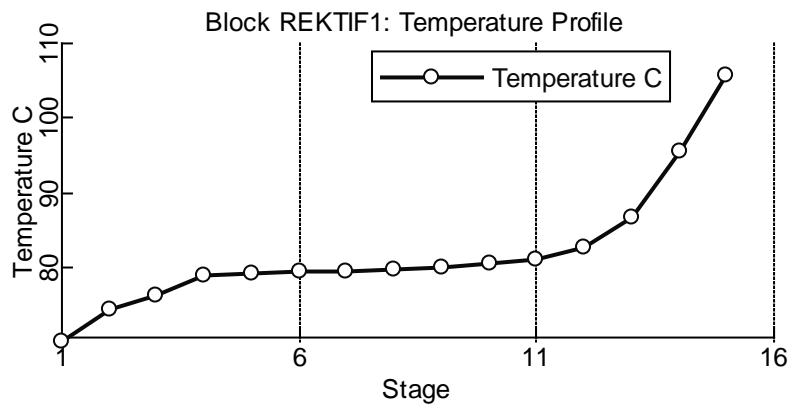


Рис. Б.27. Температурний профіль при тарілці живлення №4

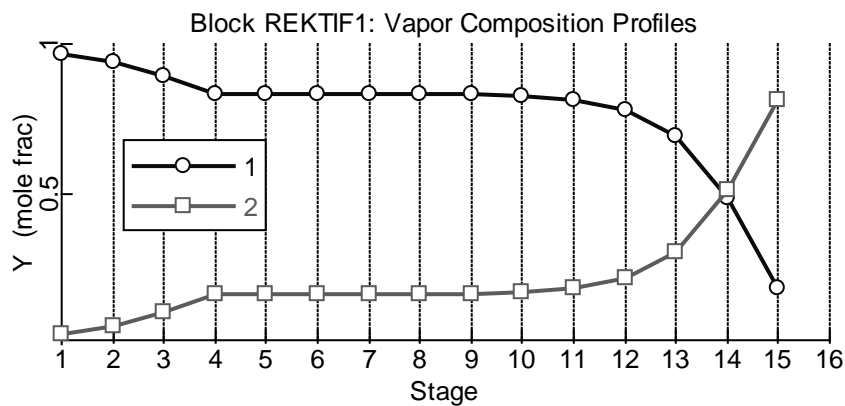


Рис. Б.28. Концентраційний профіль при тарілці живлення №4

2) Тарілка живлення №11. Величина флегмового потоку: 3,30320662 кмоль/год. Величина потоку дистилляту: 1,79999999 кмоль/год. Температурний і концентраційний профілі відображені на рис. Б.29 і рис. Б.30 відповідно.

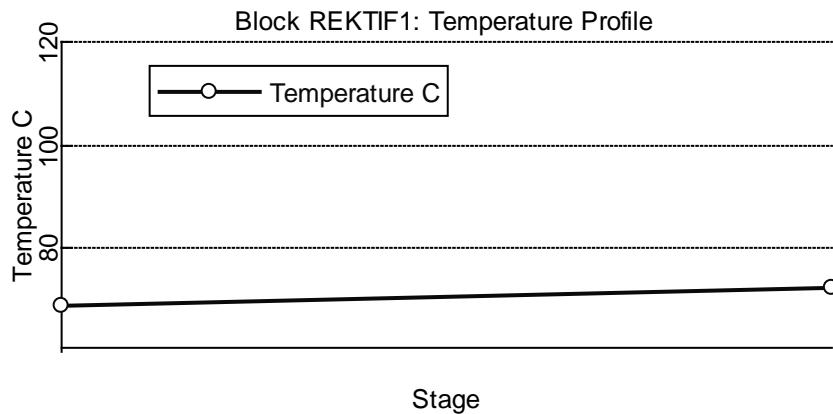


Рис. Б.29. Температурний профіль при тарілці живлення №11

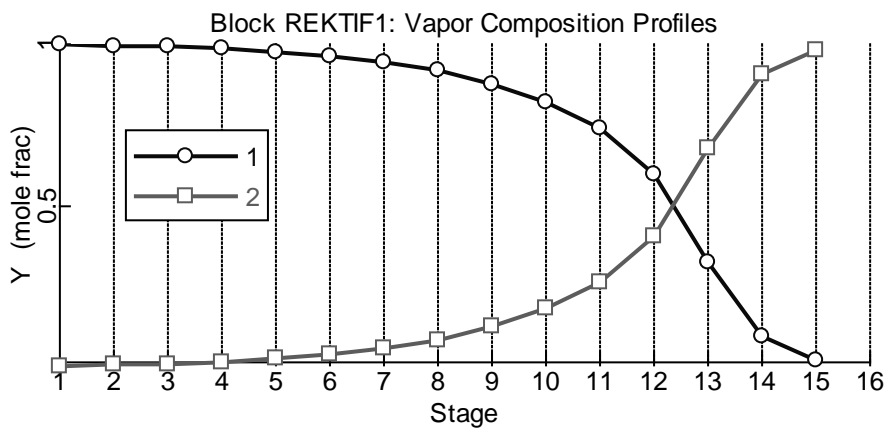


Рис. Б.30. Концентраційний профіль при тарілці живлення №11

3) Тарілка живлення №7 і відсутність перепаду тиску. Величина флегмового потоку: 3,3032 кмоль/год. Величина потоку дистилляту: 1,7999 кмоль/год. Температурний і концентраційний профілі відображені на рис. Б.31 і рис. Б.32 відповідно.

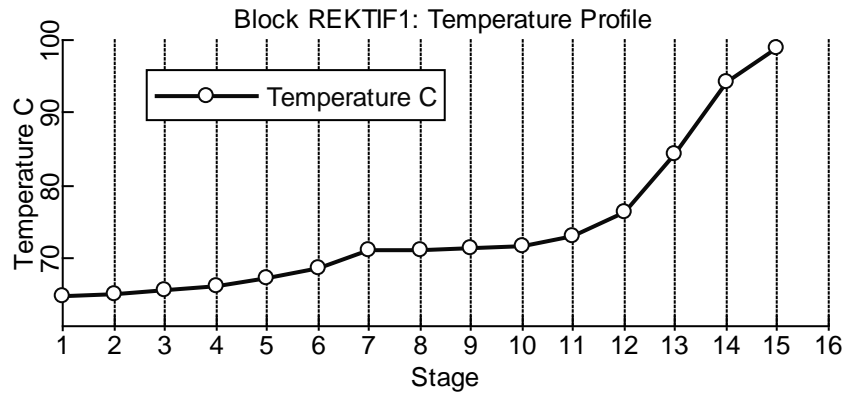


Рис. Б.31. Температурний профіль при тарілці живлення №7 і відсутності перепаду тиску

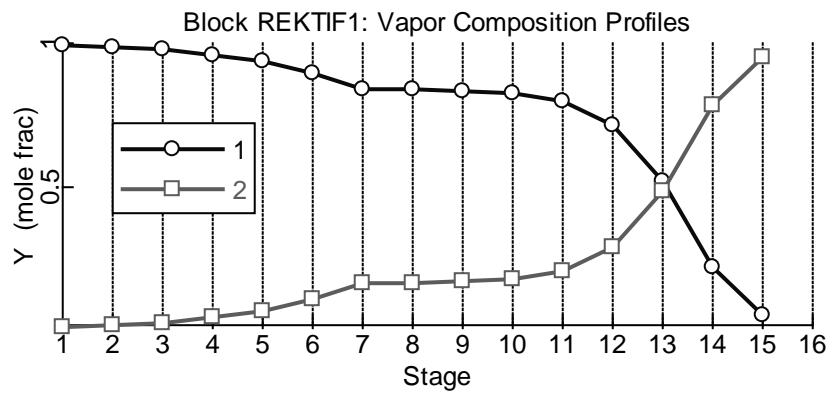


Рис. Б.32. Концентраційний профіль при тарілці живлення №7 і відсутності перепаду тиску

Б6. Порівняння VLE-моделей

Задано киплячий потік 1 моль/с з концентрацією 30% (моль) метанолу (CH_4O), 20% етанолу ($\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$) і 50% води. Вихідна суміш повинна обезводнюватись ректифікацією. Ректифікаційна колона має 25 ступенів рівноваги (тарілок). Потік подається на 21 тарілку. Тиск в колоні постійний і складає 1,013 бар. В куб підводиться 70 кВт. Половина живлення утримується як рідкий дистиллят.

Завдання на моделювання

1) Розрахувати колону з моделями рівноваги WILSON та UNIFAC, побудувати та порівняти концентраційні профілі цих моделей.

2) Мольна доля води в кубі повинна складати 95%. Визначити кількість дистилляту яка потрібна щоб забезпечити таку мольну долю води, варіюючи кількість дистилляту від 0,4 до 0,6 з кроком 0,01.

3) Яка потужність нагріву кубу, якщо її варіювати замість дистилляту для завдання 1. Половина потоку живлення повинна утримуватися як рідкий дистиллят.

4) Яка потужність нагріву кубу якщо необхідно забезпечити 90% мольну долю води в кубі.

Моделювання

Побудуємо модель технологічного процесу як показано на рис. Б.33.

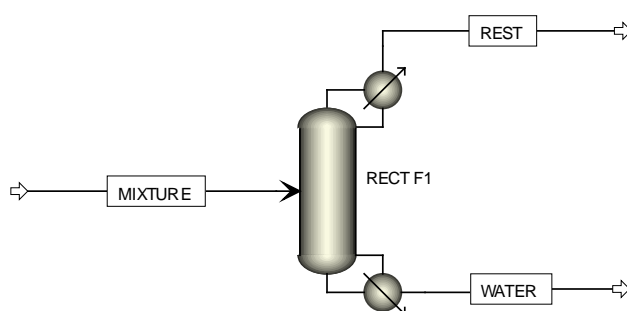


Рис. Б.33. Модель технологічного процесу

Задамо на формі *Setup->Components* компоненти які фігурують у процесі, на формі *Properties->Specification* метод WILSON та UNIFAC як модель рівноваги.

На формі *Blocks->RECTIF1->Setup* на закладці *Configuration* задамо кількість тарілок: *Number of stages*=25, умову що половина живлення повинна утримуватися як рідкий дистиллят: *Distillate to feed ratio* = 0,5, потужність нагріву кубу: *Reboiler duty*=70kW. На закладці *Streams* задаємо тарілку живлення: *Above stage*=21, на закладці *Pressure* задаємо тиск на першій тарілці: *Stage 1/Condenser pressure* = 1 atm. Тепер створення моделі завершено і можна запускати моделювання.

1) Побудуємо концентраційні профілі для моделей WILSON та UNIFAC. Відповідні криві зображено на рис. Б.34 і рис. Б.35 для цих обох методів відповідно. Як бачимо профілі при різних моделях кардинально відрізняються.

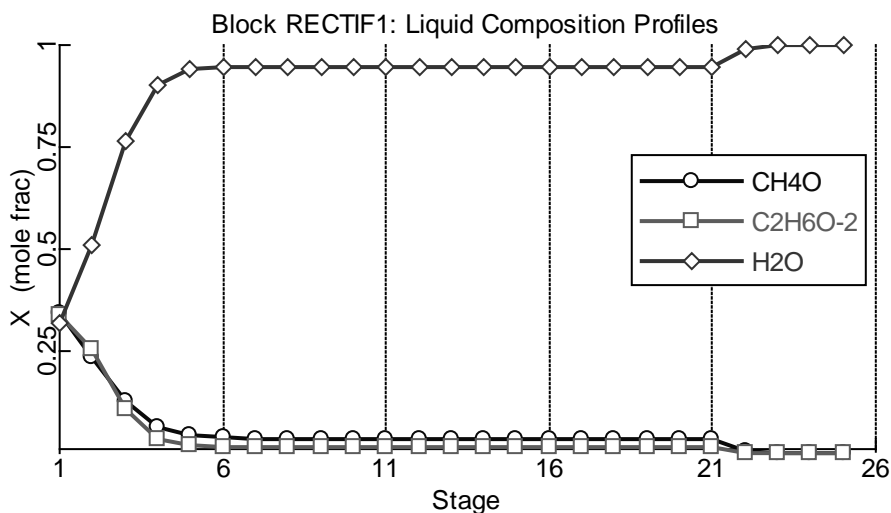


Рис. Б.34. Концентраційні профілі для рідкої фази в колоні при використанні моделі рівноваги *WILSON*

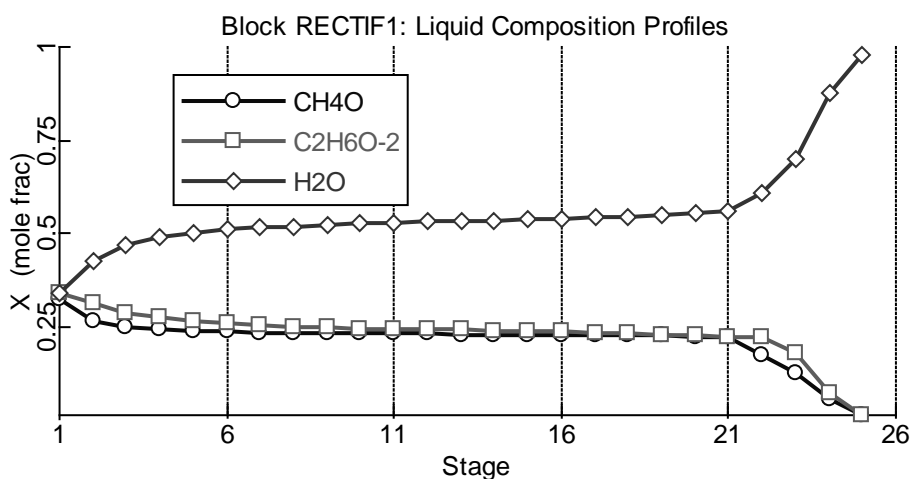


Рис. Б.35. Концентраційні профілі для рідкої фази в колоні при використанні моделі рівноваги *UNIFAC*

2) Для того щоб знайти величину потоку дистилату потрібну для забезпечення 95% концентрації води в кубі скористаємось формами **Blocks->RECTIF1->Design Spec** та **Blocks->RECTIF1->Vary**. За допомогою їх можна прослідкувати зміну однієї величини при зміні іншої в заданих границях. На формі **Blocks->RECTIF1->Design Spec** натиснемо кнопку *New* і заповнимо форму яка з'явиться у відповідності з рис. Б.36.

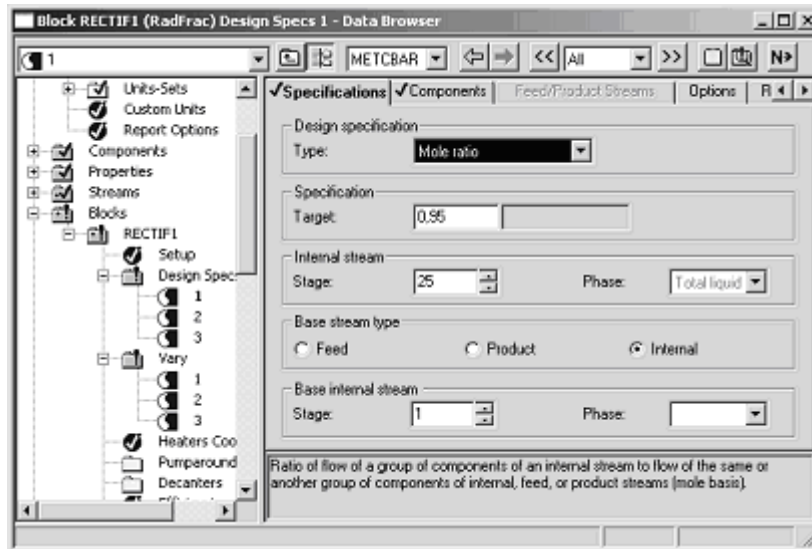


Рис. Б.36. Форма для створення технічних вимог щодо концентрації води в кубі

Заповнивши форму технічних вимог нам треба на формі **Blocks->RECTIF1->Vary** натиснути кнопку *New* і створити змінну яка буде варіюватись щоб забезпечити ці вимоги, як це відображено на рис. Б.37.

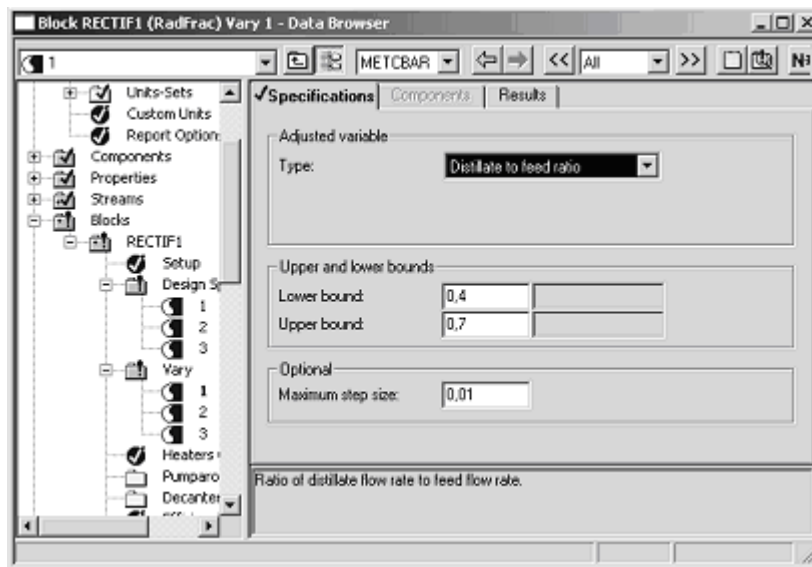


Рис. Б.37. Форма для створення змінної прив'язаної до забезпечення технологічних вимог

На формі **Blocks->RECTIF1->Design Spec->1->Specification** (яка зображена на рис. Б.36) задаємо технічну вимогу в полі тип: **Type=Mol Ratio**, ціль: **Target=0.95**, тарілка: **Stage=25** (ця тарілка відповідає кубу), тип потоку до якого буде проводитися порівняння: **Base stream type=internal** (внутрішній потік), **Base internal stream=1** (відповідає конденсатору). На формі **Blocks->RECTIF1->Vary->1->Specification** (яка зображена на рис. Б.37) задаємо тип змінної: **Adjusted variable->Type=Distillate to feed**

ratio (відношення кількості дистилляту до кількості живлення), верхню та нижню границі її варіювання: *Lower bound*=0.4 *Upper bound*=0.7, крок варіювання: *Maximum step size* = 0.01.

Після запуску моделі, зайшовши в форму *Results Summary->Blocks->RECTIF1->Vary->1* на закладку *Results* можна подивитись на значення вибраного параметра (відношення кількості дистилляту до кількості живлення) при якому забезпечується технічна вимога щодо концентрації води в кубі. Це значення *Results->Final value* = 0,60958303. Отже щоб забезпечити мольну концентрацію води в кубі на рівні 95% треба щоб відношення кількості дистилляту до кількості живлення становило приведену вище цифру.

3) Для проведення наступного аналізу можна або видозмінити тип створеної при розв'язанні задачі 2 змінної з *Adjusted variable->Type=Distillate to feed ratio* на *Adjusted variable->Type=Reboiler Duty* або створити на формі *Blocks->RECTIF1->Design Spec* нову технічну вимогу і на формі *Blocks->RECTIF1->Vary* прив'язану до цієї вимоги змінну. Якщо створити новий аналіз то він буде обраховуватися разом зі старим незалежно один від одного, тому саме таким шляхом ми і підємо. Технічні вимоги будуть однаковими з попереднім випадком. Варіювати нову змінну будемо від 0,04 до 0,08 ММkcal/hr (така розмірність відповідає вибраній метричній системі). В результаті моделювання отримаємо *Results->Final value*= 0,06038581 ММkcal/hr, що відповідає 70,2276879кВт.

4) Для розв'язання цієї задачі буде як і в попередньому випадку створено новий аналіз в якому в технічній вимозі на відміну від задачі 2 буде не 95% а 90% і в прив'язаній змінній на відміну від задачі 3 потужність нагріву кубу буде варіюватись від 0,02 до 0,1 ММkcal/hr. Знайдений результат при цьому *Results->Final value* = 0,06483574 ММkcal/hr, що відповідає 75,4028851кВт.

Форма з результатами приведена на рис. Б.38.

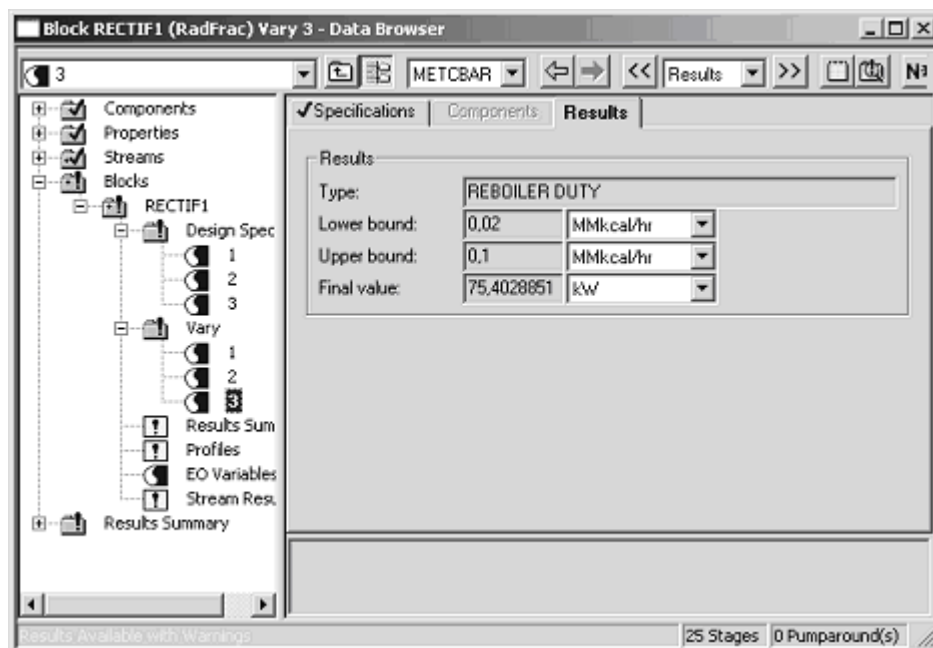


Рис. Б.38. Результати пошуку значення потужності нагріву кубу при технологічній вимозі: 90% концентрація води в кубі

Б7. Моделювання парціального конденсатора

При отриманні палива велика частина вуглеводнів випаровується в навколишнє середовище. Це не тільки порушує екологію, але й завдає великих збитків у паливі. Тому логічно видобувати вуглеводні з вихідного потоку. Необхідно вивчити, в якій мірі може зарадити цій проблемі парціальний конденсатор. Склад рідкого палива (наприклад бензину) відображено в таблиці Б3.

Таблиця Б3

Склад бензину

Формула в Aspen	Назва речовини в Aspen	ID-компонента	Витрати, % масові
C3H8	PROPANE	C3H8	0,001
C4H10-2	ISOBUTANE	C4H10-2	0,0239
C4H10-1	N-BUTANE	C4H10-1	0,0356
C6H12-E3	3-METHYL-1-PENTENE	C6H12-E3	0,1709
C5H12-1	N-PENTANE	C5H12-1	0,0372
C6H12-D2	2-METHYL-1-PENTENE	C6H12-D2	0,1723
C7H14-E9	2-METHYL-1-HEXENE	C7H14-E9	0,0628
C6H6	BENZENE	C6H6	0,0576
C7H8	TOLUENE	C7H8	0,1265
C8H10-4	ETHYLBENZENE	C8H10-4	0,1124
C8H18-2	2-METHYLHEPTANE	C8H18-2	0,0162
C8H18-1	N-OCTANE	C8H18-1	0,0038
C10H14-2	ISOBUTYLBENZENE	C10H14-2	0,0702
C9H12-1	N-PROPYLBENZENE	C9H12-1	0,0796
CH4O	METHANOL	CH4O	0,03

Схема парціального конденсатора для Aspen plus зображена на рис. Б.39.

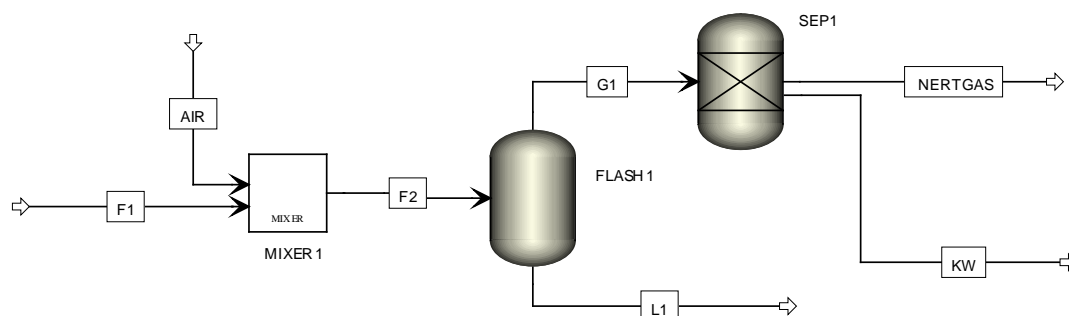


Рис. Б.39. Модель парціального конденсатора

Вхідний потік має температуру 20°C та тиск 1 атм. Для моделювання реальної картини, як відображено на рис. 7.39 перед апаратом *Flash1* бензин перемішується з повітрям з витратою 1г/м³ бензину. Склад повітря 78% азоту, 21% кисню і 1% аргону.

Моделювання

На формі *Setup->Components* задамо компоненти які фігурують у процесі, на формі *Properties->Specification* метод UNIFAC як модель рівноваги. Створимо потік для бензину *F1* витратою 1г/с і потік для повітря *AIR* витратою 1м³/с які будуть змішуватися в блоці *MIXER1*. Після цього суміш поступає у апарат *FLASH1* де розділяється на рідку та газову фази. Газова фаза поступає у віртуальний апарат розділення – сепаратор в якому від повітря (*INERTGAS*) відділяються рештки вуглеводнів. Для цього в моделі сепаратора *SEP1* ставимо навпроти концентрацій вуглеводнів в потоці *INERTGAS* 0, а для потоку *KW* ставимо 1. При температурі, при якій суміш поступає у апарат *FLASH1* розділення не відбувається, тому треба провести аналіз чутливості в ході якого змінювати температуру для блоку *FLASH1* від -147°C до 7°C з кроком 10°C. Для проведення аналізу чутливості скористаємось формою *Model Analysis Tools->Sensitivity->New*, і введемо назву нового аналізу, наприклад *S-1*. Далі на закладці *Define* аналізу *S-1* треба створити змінні використовуючи кнопку *New*. Цей процес аналогічний до розглянутого в задачі 4, тому детально зупинятися на ньому не будемо. Створимо змінні *MKW* (масова витрата для потоку *KW*), *VINERT* (об'ємна витрата для потоку *INERTGAS*), *G* (масова витрата для потоку *GI*), *GL* (масова витрата для потоку *LI*). Зміна двох з цих змінних *MKW* та *GL* приведена на рис. Б.40. Як бачимо з приведеного нижче графіка при низькій температурі практично всі вуглеводневі складові потоку конденсуються в апараті *FLASH1* і виділяються у вигляді конденсату *LI* масову витрату якого представляє собою змінна *GL*. З підвищенням температури конденсація в апараті припиняється і практично всі вуглеводні відділяються в сепараторі, а в конденсаті вони відсутні вже при температурі вище за -30°C.

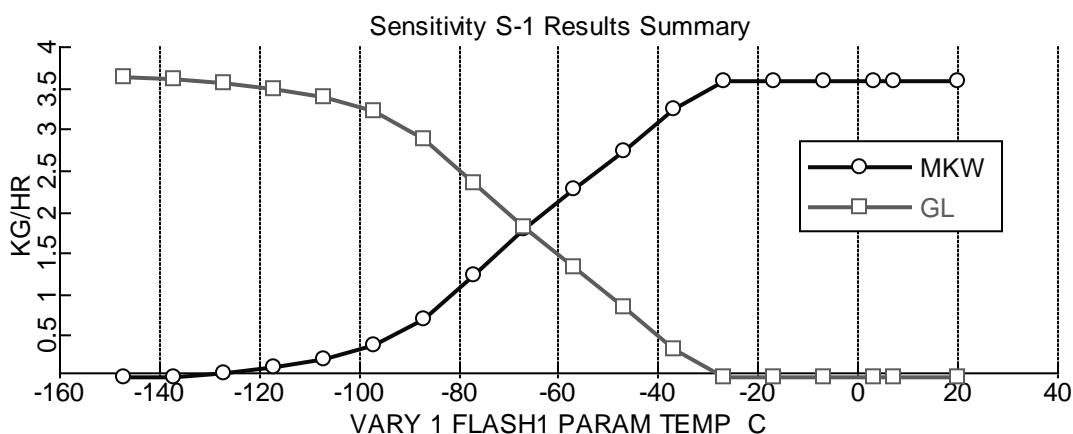


Рис. Б.40. Масові витрати потоків *KW*(змінна *MKW*) та *LI*(змінна *GL*)

Значення цих змінних, а також решти тих що були створені для даного аналізу процесу приведені в таблиці Б.4. Як бачимо з приведенної таблиці об'єм інертних для даного процесу газів (повітря) не міняється.

Результати аналізу на чутливість

VARY I FLASHI PARAM:TEMP	MKW	VINERT	G	GL
C	KG/HR	CUM/HR	KG/HR	KG/HR
-147	0,00215170	8,01529925	4335,52538	3,64845375
-137	0,01175714	8,01533358	4335,5541	3,61971758
-127	0,04740662	8,01535292	4335,60051	3,57333017
-117	0,12222096	8,0153648	4335,68191	3,49192177
-107	0,21737733	8,01537227	4335,78121	3,39262827
-97	0,37590323	8,01537734	4335,94253	3,23130158
-87	0,71301012	8,01538132	4336,28184	2,891995
-77	1,24088105	8,01538459	4336,81151	2,3623167
-67	1,78274326	8,01538691	4337,35465	1,81919028
-57	2,27921478	8,01538845	4337,85196	1,32187311
-47	2,75066079	8,01538943	4338,32394	0,84989023
-37	3,25674223	8,01539011	4338,8304	0,34343879
-27	3,59999997	8,01539044	4339,17384	0
-17	3,59999997	8,01539044	4339,17384	0
-7	3,59999997	8,01539044	4339,17384	0
3	3,59999997	8,01539044	4339,17384	0
7	3,59999997	8,01539044	4339,17384	0

Б8. Моделювання технологічної схеми „компресор – газова турбіна”

Потік повітря 30 кг/с із навколишнього середовища (температура 15°C, тиск 1 атм) складу: 79% (мольних) азоту, 21% кисню стискається ізоентропійно в компресорі до тиску 1,6 МПа (16 бар). Механічна ступінь ефективності компресора складає 98%, ізоентропійний коефіцієнт корисної дії 82%. Стиснуте повітря разом з 0,75 кг/с горючого газу 90% (мольних) метану, 10% азоту підводиться в камеру згоряння. Метан згорає повністю на двоокис вуглецю і воду, тому камера моделюється як стехіометричний адіабатичний реактор. Тиск залишається постійним. Гарячі вихлопні газу розширюються в ізотропній турбіні (з параметрами ефективності як у компресора) і тиск падає на 1,25 атм. Компресор і турбіна зв'язані між собою жорстким валом і енергія газу перетворюється на потужність.

Завдання на моделювання

Провести моделювання даного технологічного процесу з використанням обмежень на температуру вихідного потоку з реактора не більше 1400K при одночасному максимуму потужності на виході зі схеми. При максимізації варіюється масовий потік газу від 0,3 до 0,8 кг/с.

Моделювання

Модель буде мати вигляд як зображено на рис. Б.41.

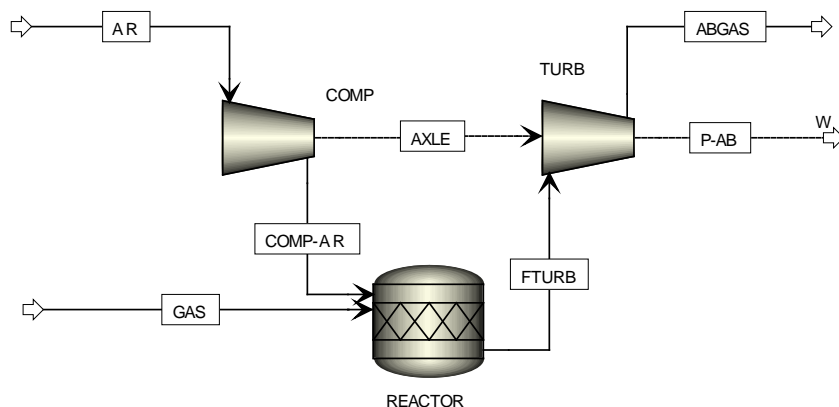


Рис. Б.41. Модель технологічної схеми компресор – газова турбіна

Для компресора і турбіни використаний блок *Compr* для реактора *RStoic*, для потужності *Work Stream*. На формі *Setup->Components* задамо компоненти які фігурують у процесі, на формі *Properties->Specification* метод UNIFAC як модель рівноваги. Відповідно із завданням задається специфікація потоків *AIR* та *GAS*. На формі *Blocks->Comp->Setup* тип моделі компресора *Compressor model/Type=Isentropic*, вихідний тиск *Discharge pressure=1.6* МПа, ефективність (ККД): *Efficiency/Isentropic=0.82*, *Efficiency/Mechanical=0.98*.

Аналогічно задаються і параметри турбіни, тільки там вибирається не *Discharge pressure*, а *Pressure Change =-1.25* атм. Для моделі реактора необхідно задати реакцію

та ступінь перетворення метану. Це робиться за допомогою форми **Blocks->REACTOR->Setup** закладки **Reactions**, як це видно з рис. Б.42.

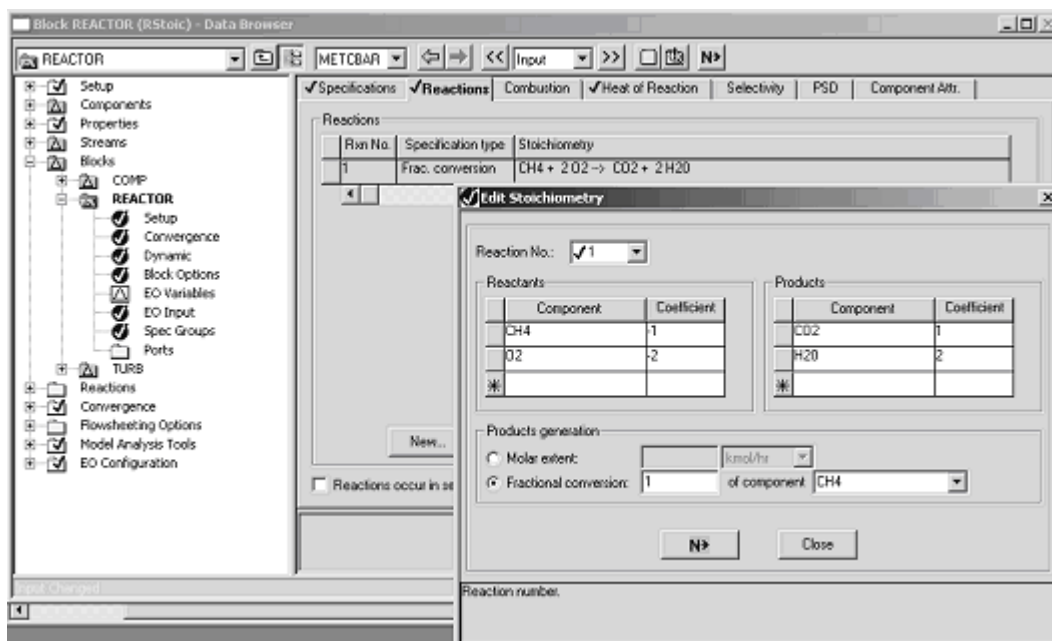


Рис. Б.42. Внесення даних про хімічну реакцію

Спочатку натискається кнопка „New...” і задається номер реакції, потім у вікні яке відкриється після цього задаються решта параметрів. Навпроти вихідних компонентів ставляться стехіометричні коефіцієнти, навпроти продуктів – стехіометричні коефіцієнти зі знаком мінус. Нижче задається ступінь перетворення по метану (**Fractional conversion**).

Для введення обмежень на температуру вихідного потоку з реактора в **Data Browser** вибираємо **Model Analysis Tools->Constraint** натискаємо кнопку **New** і задаємо обмеженню ім'я, наприклад **C-1** далі на закладці **Define** обмеження **C-1** натискаємо кнопку **New** і створюємо нову змінну **T**. На закладці цієї ж форми **Spec** задаємо ім'я новоствореної змінної і задаємо тип обмеження менше чи рівно 1400 з допуском 0,01.

Тепер проведемо оптимізацію процесу – знайдемо таке значення витрат палива при якому потужність на виході **P-AB** буде максимальна. Для цього в **Data Browser** вибираємо **Model Analysis Tools->Optimization** натискаємо кнопку **New** і задаємо оптимізації ім'я, наприклад **O-1** далі на закладці **Define** оптимізації **O-1** натискаємо кнопку **New** і створюємо нову змінну **P**, як змінну потоку **P-AB** (потужність) з типом **Work power**. На закладці **Objective & Constraints** вводимо ім'я цієї новоствореної змінної і вибираємо тип оптимізації – максимізація, а також задаємо раніше створене обмеження **C-1**.

На закладці **Vary** задаємо параметр який ми будемо змінювати щоб оптимізувати потужність на виході. Форма **Vary** показана на рис. Б.43.

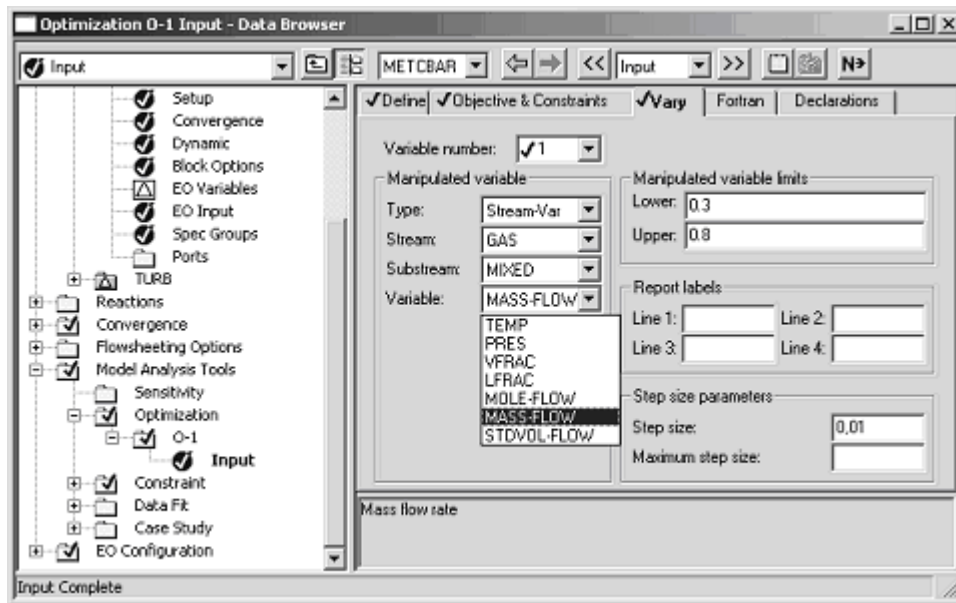


Рис. Б.43. Форма для створення змінної, яка буде варіюватись при оптимізації

Результати моделювання представлені у таблиці Б.5.

Таблиця Б.5

Результати оптимізації

Статус	Потік	Змінна	Один.	Значення
До оптимізації:	P-AB	POWER	kW	11981,58
Після оптимізації:	P-AB	POWER	kW	12021,72

Температура газу після стиснення в компресорі складає: 422,82°C.

Температура газу на виході з турбіни складає: 1373,83°C.

Б9. Синтез послідовності розділення

Завдання на моделювання

Вхідний потік киплячої рідини (1 моль/с) мольним складом: пентан (C_5H_{12-1}) – 0,5, гексан (C_6H_{14-1}) – 0,2, гептан (C_7H_{16-1}) – 0,3 і тиску оточуючого середовища (1 атм.) розділяється на продукти. Продукти повинні бути рідкими, чистотою не менше чим 99% мольних. Для цього треба аналізувати призначену для синтезу систему розділення.

Вказівки до моделювання. При синтезі системи розділення треба виходити із евристичних правил:

1) Якщо вибрати ректифікацію як можливу операцію розділення, то для розділення 3-х компонентної суміші чітко визначається місце розділення і буде потрібно дві колони.

2) Спочатку виділяється переважаючий компонент.

3) Продукти з вищими вимогами чистоти необхідно виділяти спочатку як дистилят.

4) Бажано використовувати еквімолярне розділення (50:50).

5) Легко киплячі компоненти виділяються як дистилят першої колони. Кубовий продукт першої колони являється живленням в другій, де розділяється залишкова суміш.

Якщо розглядають звичайну ректифікаційну колону з потоком живлення, двома продуктами, двома теплообмінними апаратами, то геометрична ступінь свободи дорівнює двом (загальне число тарілок, тарілка живлення). Виробнича ступінь свободи – число змінних величин, котрі можуть варіюватися для управління і регулювання (наприклад флегмове число). Якщо вхідний потік заданий чи фіксований на попередньому кроці процесу, то виробнича ступінь свободи дорівнює двом. В вибраній схемі з двома ректифікаційними колонами, причому живлення першої колони задано, а живлення другої колони фіксовано кубовим продуктом число першої, ступенів свободи дорівнює 8. Так як Aspen plus не призначений для синтезу процесу, то повинно встановлюватись відповідне число ступенів свободи перед імітацією. В нашому випадку необхідно задавати вісім величин.

Для ідеальних багатокомпонентних сумішей існують теорії (Фенске, Ундервуд і Жиланд) за допомогою яких можна оцінити мінімальне число ступенів розділення, сприятливу тарілку живлення, а також мінімальне флегмове число. Більше того, існує можливість крок за кроком в шукане рішення додавати результати інтуїції про невідомі величини в результаті аналізу процесу.

Колони бажано синтезувати окремо одна від іншої. Тільки в кінці, якщо обидва кроки розділення дають задовільні результати, можна з'єднувати колони. Число ступенів розділення треба задавати не занадто великим (30 являється хорошим наближенням), живлення подається в середину колони, флегмове та парове числа ставляться на 3.

При нескінченній кількості теоретичних тарілок максимальні затрати розділення. При максимально флегмовому числі профіль концентрації в колоні відповідає лінії дистиляції.

Необхідно оптимізувати рішення так, щоб флегмове число було в 1,1-1,3 вище за мінімальне. Число тарілок повинне бути при цьому по можливості малим. Цей пункт передбачує компроміс між низькою вартістю капіталовкладень (число ступенів) і невеликими витратами підприємства в енергії теплоти та холоду.

Загальний тепловий баланс сходиться в точності достатньо рідко. Причина цього лежить в тому, що Aspen plus приймає кубовий продукт завжди киплячою рідиною і тепловий стан дистилляту відповідає величині RDV . Помилка балансу при моделюванні складає менше 5%.

Більш витончено вибрати для змінної виробничої величини колони кількісне співвідношення (наприклад D/F) або абсолютну кількість (наприклад, D).

Для знаходження оптимального рішення треба використати можливості які пропонує Aspen plus: *Spec Vary*, *Design spec*, *Optimize*, *Constraint*, *Sensitivity*. При цьому треба звернути увагу на те, що нераціонально використовувати більше двох з цих можливостей одночасно, бо рішення може не зійтись.

Моделювання

Вигляд моделі в Aspen представлено на рис. Б.44.

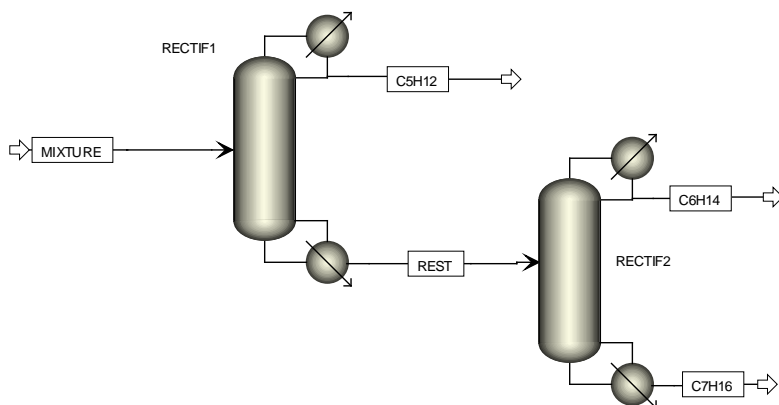


Рис. Б.44. Модель процесу розділення

Для моделі ректифікаційної колони використаємо блок *RADFRAC*. На формі *Setup->Components* задамо компоненти які фігурують у процесі, на формі *Properties->Specification* метод UNIFAC як модель рівноваги. Відповідно із завданням задається специфікація потоку *MIXTURE*. На формі *Blocks->RECTIF1* на закладці *Configuration* задаємо число тарілок: *Number of stages*=30, тип конденсатора: *Condenser=Total* (лише рідкий дистиллят), флегмове число: *Reflux ratio*=3, відношення кількості дистилляту до кількості живлення: *Distillate to feed ratio*=0.5; на закладці *Streams* задаємо тарілку живлення 3 (*Above stage*); на закладці *Pressure* задаємо тиск на першій тарілці *Stage I*=1 атм. Аналогічно для апарату *RECTIF2*: на закладці *Configuration* задаємо число тарілок: *Number of stages*=30, тип конденсатора: *Condenser=Total* (лише рідкий дистиллят), флегмове число: *Reflux ratio*=3, відношення кількості дистилляту до кількості живлення: *Distillate to feed ratio*=0.5; на закладці *Streams* задаємо тарілку живлення 3 (*Above stage*); на закладці *Pressure* задаємо тиск на першій тарілці *Stage I*=1 атм. Результати моделювання приведені в таблиці Б.6.

Результати моделювання по потокам

	C5H12	C6H14	C7H16	MIXTURE	REST
Temperature C	36,0469021	56,9250533	97,475743	49,4298548	72,310775
Pressure bar	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325
Vapor Frac	0	0	0	0	0
Mole Flow kmol/hr	1,79999999	0,89999999	0,89999999	3,59999997	1,79999999
Mass Flow kg/hr	129,870524	74,228871	89,9060318	294,005427	164,134903
Volume Flow cum/hr	0,21325183	0,11873386	0,14600159	0,47205086	0,26229001
Enthalpy MMkcal/hr	-0,0737176	-0,0398868	-0,0443216	-0,1597861	-0,0848953
Mole Flow kmol/hr					
C5H12-1	1,79999849	0,23745324	3,9071e-09	2,03745174	0,23745325
C6H14-1	1,4917e-06	0,66253565	0,01979081	0,68232795	0,68232646
C7H16-1	1,8026e-13	1,11e-05	0,88020918	0,88022028	0,88022028

Як бачимо в потоці **REST** який виходить з колони **RECTIF1** значна кількість компоненту гексану (C_5H_{12-1}), тобто ректифікаційні колони не забезпечують необхідну чистоту всіх продуктів.

Проведемо пошук такого відношення потоку дистилляту до потоку живлення при якому концентрація вихідних компонентів в кубовому залишку буде складати не менше 0,005 мольних долей (99,5% чистота продукту).

Створимо за допомогою форми **RECTIF1->Design Spec->New** цільову концентрацію продукту в кубовому залишку. Задамо на закладці **Specification Type=Mol purity**, на закладці **Components** виберемо в полі **Selected components** компонент C_5H_{12-1} і на закладці **Feed/Product streams** виберемо потік **REST**. Після цього створимо змінну, яка буде варіюватись щоб забезпечити вибрану вище ціль. Зайдемо на форму **RECTIF1->Vary->New** і створимо нову змінну для якої на закладці **Specification** задамо тип: **Type=Distillate to feed ratio** (відношення кількості дистилляту до кількості живлення), нижню границю: **Lower bound=0.3** та верхню границю: **Upper bound=0.8**. Аналогічно робимо і для блока **RECTIF2**. Лише для цілі вибираємо компонент не C_5H_{12-1} , а C_6H_{12-1} і не потік **REST** а потік C_7H_{12-1} , всі інші кроки повторюються. Отримаємо результат, який приведено в таблиці Б.7.

Результати роботи схеми після оптимізації

	C5H12	C6H14	C7H16	MIXTURE	REST
Temperature C	36,0469007	68,1523952	98,1875817	49,4298548	82,3000811
Pressure bar	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325	1,01325
Vapor Frac	0	0	0	0	0
Mole Flow kmol/hr	2,02960129	0,68581309	0,88458559	3,59999997	1,57039869
Mass Flow kg/hr	146,436323	58,9920949	88,5770091	294,005427	147,569104
Volume Flow cum/hr	0,24045344	0,09421303	0,14393846	0,47205086	0,2368252
Enthalpy MMkcal/hr	-0,0831207	-0,0310023	-0,0436084	-0,1597861	-0,0749649
Mole Flow kmol/hr					
C5H12-1	2,02959974	0,00785199	5,9113e-11	2,03745174	0,00785199
C6H14-1	1,544e-06	0,67790342	0,00442299	0,68232795	0,68232641
C7H16-1	1,8327e-13	5,7681e-05	0,8801626	0,88022028	0,88022028

Як бачимо після оптимізації в кожному потоці, який представляє результуючу чисту речовину домішки складають тисячні долі, тобто результат забезпечено. В *Data Browser* де представлені результати моделювання можна подивитись які значення шуканого параметра забезпечує необхідну чистоту. Форма з результатами для першої колони представлена на рис. Б.45.

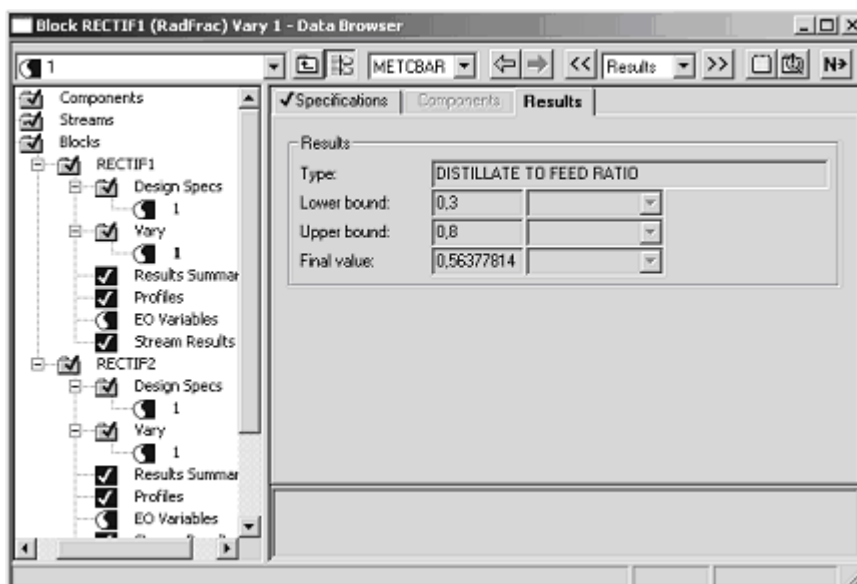


Рис. Б.45. Значення вибраної для оптимізації змінної

Для колони *RECTIF1* це значення 0,56377814 (відношення кількості дистилату до кількості живлення), а для колони *RECTIF2* воно складає 0,43671273.

Б10. Моделювання очистки екстракцією оцтової кислоти

Завдання на моделювання

Дано потік 1100 кг/год оцтової кислоти з 33% вмістом кислоти. Для того щоб зменшити затрати ректифікації більша частина води повинна відділятися при екстракції. Суміш що залишиться після екстракції розділяється ректифікацією. Чисто ректифікаційне розділення було б дуже енергоємним, так як вся вода повинна випаровуватись и добуватись як дистиллят.

Вказівки щодо моделювання. Для моделювання треба використати банк даних речовин *PURECOMP* і *UNIFAC* – метод як модель фазової рівноваги. Так як оцтова кислота в паровій фазі утворює складну молекулу, повинна враховуватись не ідеальність в паровій фазі. Тому потрібно вибрати *NRTL*- модель для рівноваги фаз між водою, оцтовою кислотою і екстрагентом Метил-терт-бутил-етер (*MTBE*, в Aspen Plus формула C5H12O-D2).

Крок ректифікації.

З даного потоку повинна екстрагуватись оцтова кислота з допомогою екстракції рідина-рідина і 800 кг/год екстрагенту (*MTBE*). Екстрактор працює з сімома теоретичними ступеннями при 1 атм і 30°C. Рафінад, що залишає екстрактор складається переважно з води, яку можна направити на очистку стічних вод, котра тут не розглядається.

Потік екстракту, що виходить з екстрактора нагрівається в теплообмінному апараті до температури кипіння і подається на ректифікацію. Тут оцтова кислота повинна відділятися як чистий кубовий продукт. Потік екстракту повинен по можливості включати невелику кількість води (максимально 85% мольних), щоб можна було отримати чисту оцтову кислоту.

Моделювання

1. Спочатку моделюється процес екстракції (без ректифікації). Ключовими компонентами обох фаз, що утворилися будуть вода для фази *L1* та оцтова кислота і *MTBE* для фази *L2*. Зміною тиску можна знехтувати.

2. Екстракційна оцтова кислота далі може відділятися ректифікацією. За допомогою *Design*-специфікації можна задати число молей оцтової кислоти в екстракті. Для цього треба варіювати потік маси розчинника *MTBE*. Треба звернути увагу на те, що при варіюванні масового потоку *MTBE*, кг/год не являється одиницею СИ. Верхню і нижню границі необхідно вказувати в кг/с. Також треба звернути увагу на перерахунок мольних долів в масові.

3. Потім екстракт розділяється в ректифікаційній колоні з 28-ма теоретичними ступеннями розділення. Потік подається в вигляді киплячої рідини на 16-ту тарілку. Так як суміш що розділяється являється азеотропною, то треба використовувати в моделі *RADFRAC* опцію *AZEOTROPIC* і алгоритм *NONIDEAL*. Продукти необхідно отримувати у вигляді рідини.

Для мольного флегмового відношення в якості першої оцінки можна встановити *RR=2* і для парового числа *BR=3* (раціонально змінювати в діапазоні між 0,5 і 10).

Треба варіювати (в декількох спробах) дві вільні змінні величини ректифікації з ціллю відділяти оцтову кислоту чистотою не менше ніж 92% мольних. При цьому треба мати на увазі те, що між оцтовою кислотою та водою приблизно нижче 15% мол.

оцтової кислоти зустрічається стан, при якому навіть використана азеотропна модель розраховує рівновагу з помилкою.

4. Отриманий дистиллят, що складається з води та *MTBE*, охолоджується в теплообмінному апараті до 30°C. При такій температурі вода і *MTBE* не повністю змішані, утворюється границя суміші. В подальшому роздільники рідина-рідина розділяють обидві фази. Для моделі сепаратора використовується модель *FLASH3* (3 фази), тут потік газу треба поставити на нуль. Суміш розділяється на стічну воду і *MTBE*.

5. В сепараторі потік *MTBE* повинен перед екстракцією змішаний з розчинником. Цим реалізується повний замкнутий цикл розчинника. Картина розчинення може бути отримана в результаті багаторазового моделювання. Дуже вірогідні проблеми збігання. В такому випадку необхідно перевірити вхідні дані на правильність і переконливість.

6. Треба проаналізувати що зміниться, якщо змішати перед сепаратором потік чистого *MTBE* з розчинником водою потоком.

7. Додаткове завдання: Специфікацію дизайну (завдання 2) можна замінити блоком *OPTIMIZE*. Ціллю повинен бути мінімум кількості води в екстракті. Перевірити чи можна ще покращити результат попередньої спроби.

Вигляд моделі в Aspen Plus представлено на рис. Б.46.

Для моделі ректифікаційної колони використаємо блок *RADFRAC*. На формі *Setup->Components* задамо компоненти які фігурують у процесі, на формі *Properties->Specification* метод UNIFAC як модель рівноваги. Відповідно із завданням задається специфікація вхідного в *Data Browser'i*.

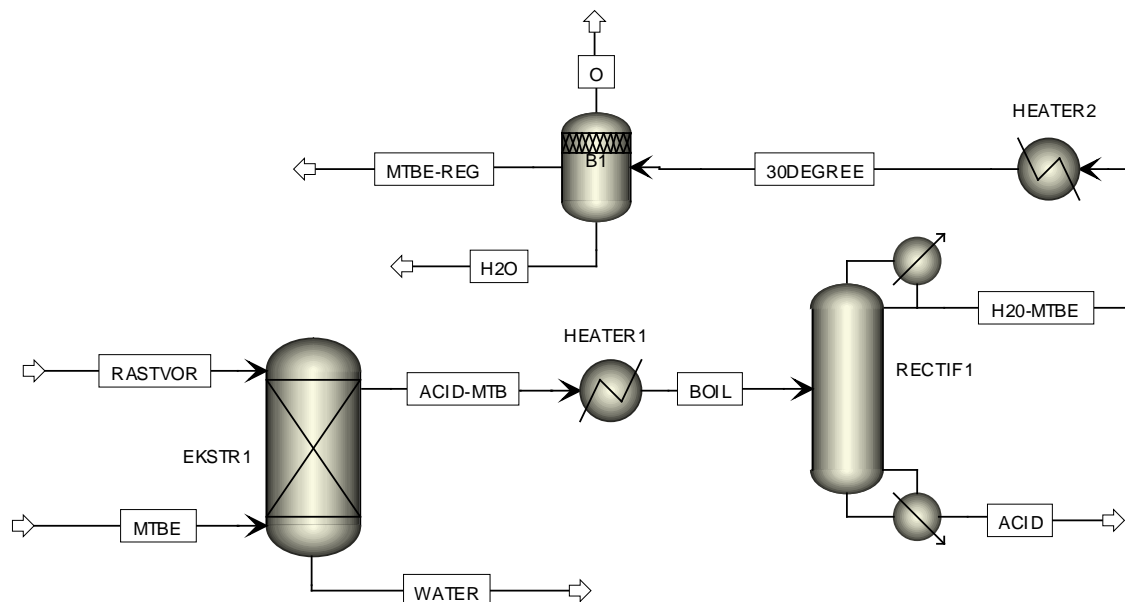


Рис. Б.46. Модель процесу екстракції

На формі *Blocks->RECTIF1* на закладці *Configuration* задаємо число тарілок: *Number of stages=28*, тип конденсатора: *Condenser=Total* (лише рідкий дистиллят), флегмове число: *Reflux ratio=2*, парове число: *Boil up ratio=3*, збіжність *Convergence=Azeotropic*; на закладці *Streams* задаємо тарілку живлення 16 (*Above*

stage); на закладці *Pressure* задаємо тиск на першій тарілці *Stage 1*=1 атм. Далі за допомогою *Design-spec* визначаємо параметри *Reflux ratio* та *Boil up ratio* такі щоб забезпечити вимоги по чистоті оцтової кислоти. Параметри на формах *Design-spec* задаються у відповідності з рис. Б.47 і рис. Б.48 (створюється дві специфікації).

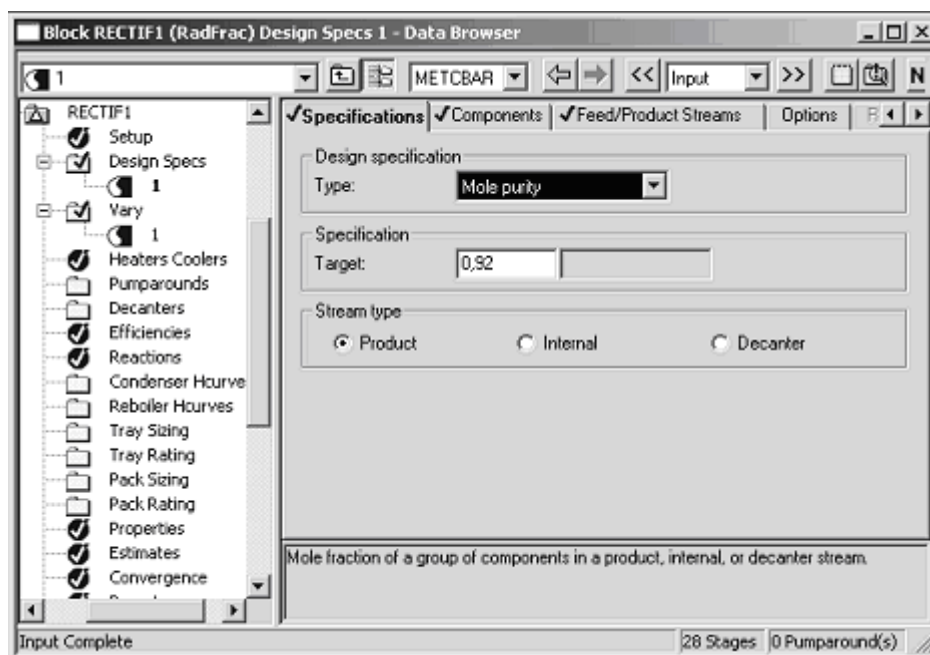


Рис. Б.47. Параметри *Design-spec* для першої вимоги

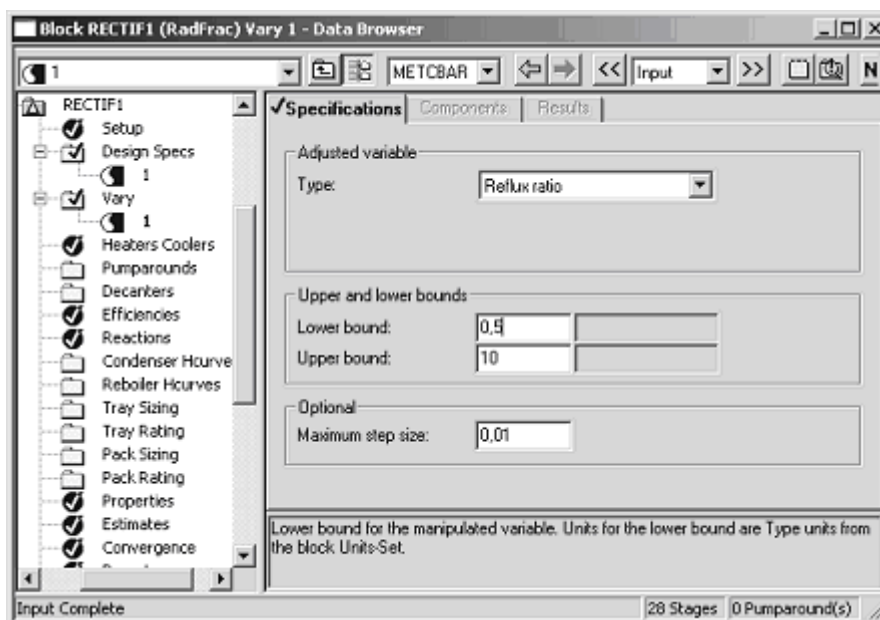


Рис. Б.48. Параметри змінної для *Design-spec* для першої вимоги

Аналогічним чином варіюємо парове число. В результаті пошуку знайдемо значення флегмового і парового чисел: 0,56 і 7,2 відповідно.

Оскільки для інших апаратів такої настройки не вимагалось то отримуємо готовий розв'язок, зображений на рис. Б.49.

The screenshot shows the 'Stream Table' window in Aspen Plus. The window title is 'Material' and it has several tabs: 'Heat', 'Load', 'Work', 'Vol. % Curves', 'Wt. % Curves', 'Petro. Curves', and 'Poly. Curves'. The 'Display' dropdown is set to 'All streams' and the 'Format' dropdown is set to 'GEN_M'. There is a 'Stream Table' button. The table below shows the results for nine streams: 30DEGREE, ACID, ACID-MTB, BOIL, H2O, H2O-MTBE, MTBE, and MTBE-REG. The rows represent different process variables: Temperature C, Pressure bar, Vapor Frac, Mole Flow kmol/hr, Mass Flow kg/hr, Volume Flow cum/hr, and Enthalpy MMkcal/hr.

	30DEGREE	ACID	ACID-MTB	BOIL	H2O	H2O-MTBE	MTBE	MTBE-REG
Temperature C	30,0	118,0	26,2	66,1	30,0	52,5	30,0	30,0
Pressure bar	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013	1,013
Vapor Frac	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mole Flow kmol/hr	31,308	9,688	40,996	40,996	8,067	31,308	20,420	23,241
Mass Flow kg/hr	2057,948	581,766	2639,714	2639,714	160,766	2057,948	1800,000	1897,183
Volume Flow cum/hr	2,614	0,615	3,124	3,320	0,165	2,707	2,466	2,513
Enthalpy MMkcal/hr	-2,339	-1,041	-3,368	-3,350	-0,558	-2,303	-1,523	-1,774

Рис. Б.49. Частина вікна з результатами по потокам моделювання даної системи

При даному моделюванні для ректифікаційної колони отримано чистоту продукту 0,99 для оцтової кислоти.

Під час виконання розрахунків було розглянуто такі типові процеси хімічної технології як: ректифікація, теплообмін, конденсація, екстракція; процеси які протікають у випарнику, турбіні, компресорі, реакторі. Було досягнуто прийнятних рішень для всіх задач. Тому подібні обчислення можна використовувати при виконанні бакалаврських, дипломних та курсових робіт із застосуванні програми Aspen Plus.

Додаток В

Приклади рішення технологічних задач із використанням програми Chemcad

В.1 Комп'ютерні дослідження схеми отримання етанолу

Опис процесів отримання етанолу

Етанол (етиловий спирт, винний спирт) — органічна сполука, представник ряду одноатомних спиртів складу, має формулу C_2H_5OH . За звичайних умов є безбарвною, легкозаймистою рідиною з характерним спиртовим запахом. Легко змішується з водою, має низьку температуру кристалізації та має низьку температуру кипіння. В залежності від освітлення горить ледь помітним синім полум'ям. Пари етилового спирту є вибухонебезпечними.

Етанол є одним їх найважливіших і великомасштабних продуктів органічного синтезу.

Етиловий спирт знаходить широке застосування в народному господарстві в якості розчинника, антисептика, сировини для виробництва синтетичного каучуку, кормових дріжджів, штучного шовку, бездимного порошу і напівпродукту основного органічного синтезу при отриманні ацетальдегіду, хлороформу, оцтової кислоти, діетилового ефіру, компонента ракетного палива і антифризу. Значна частина виробленого етанолу витрачається на виготовлення спиртних напоїв, в парфумерної промисловості.

Промислові способи виробництва етанолу, а разом з тим і структура споживаного для цієї мети сировини, безперервно змінювалися. На зміну ректифікації вина (звідси і назва етанолу - винний спирт) прийшли методи, засновані на хімічній переробці сировини. З кожним роком спирт, одержуваний з харчової сировини, замінюється синтетичним, гідролізним і сульфїтним; 1 т етилену дозволяє заощадити 4 т зерна. Синтетичний спирт з етилену в кілька разів дешевше харчового і вимагає менших витрат праці.

Слід розрізняти харчовий, медичний етанол від промислового. Етанол призначений для використання в медичних, харчових цілях та для використання в парфумах виготовляється виключно ферментацією, в той час як промисловий виготовляється з продуктів нафтової промисловості, зокрема етилену.

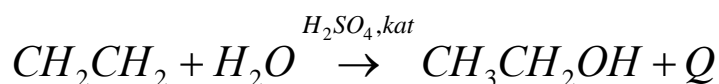
Світове виробництво спирту становить близько 90 млрд. літрів за рік. У зв'язку з цим виробництво етилового спирту відноситься до розряду великотоннажних, що слід враховувати при виборі способу виробництва. Останнє має відповідати екологічним вимогам і бути економічно виправданим.

В Україні виробництво етанолу представлено концерном «Укрспирт» який виробляє 360 млн. літрів етилового спирту на рік.

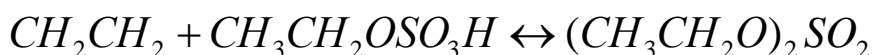
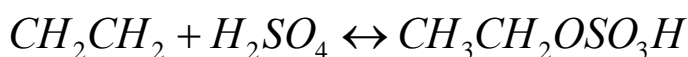
Актуальність даної роботи полягає в тому що на даний момент 90% етилового спирту в Україні виробляється з рослинної сировини, цей спирт можна використовувати в технічних цілях, але виробляти його з сировини нафтопереробки було б доцільніше так як він не повинен відповідати таким високим вимогам як спирт органічної сировини.

Для отримання етанолу з промислового етилену є два основні шляхи. Історично першим став метод непрямої гідратації, винайдений у 1930 році компанією «Union Carbide». Інший, розроблений у 1970-х роках, був розроблений, як безкислотний метод (відмова від використання сульфатної кислоти).

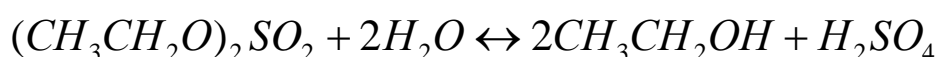
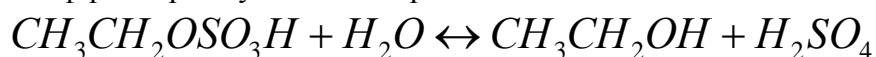
Процес непрямой (сірчаноокислої рідинної) гідратації може бути описаний сумарним рівнянням



Спочатку етилен взаємодіє з концентрованою сірчаною кислотою при температурі 70-90°C. При цьому відбувається фізичне розчинення етилена в сірчаній кислоті із утворенням етилсульфату, який потім взаємодіє з етиленом, утворюючи диетилсульфат.



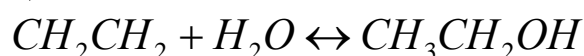
Отримані ефіри гідролізують згідно реакціям:



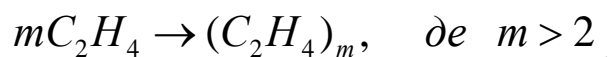
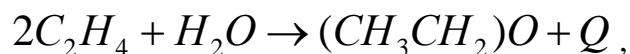
Крім цього ще відбувається й побічна реакція з утворенням діетилового ефіру. Для її пригнічення необхідно при проведенні гідролізу відводити утворений спирт.

Перевагою методу сірчаноокислої гідратації етилену є можливість використання неконцентрованої етиленової фракції. Недоліком же даного методу є утворення розбавленої, забрудненої органічними з'єднаннями 40-50%-ї сірчаної кислоти (до 25 тонн на 1 тонну етанолу), яку потрібно очищати та концентрувати. Нажаль, це потребує великих капіталовкладень.

На відміну від процесу сірчаноокислої гідратації безкислотний процес протікає в одну стадію без проміжного виділення якихось з'єднань і може бути реалізований в двох варіантах: газофазному та рідкому. На даний час етанол в промисловості синтезують переважно газофазним шляхом. Вихідний етилен та воду пропускають над вугільним каталізатором, що насичений ортофосфатною кислотою, в результаті чого відбувається основна реакція:

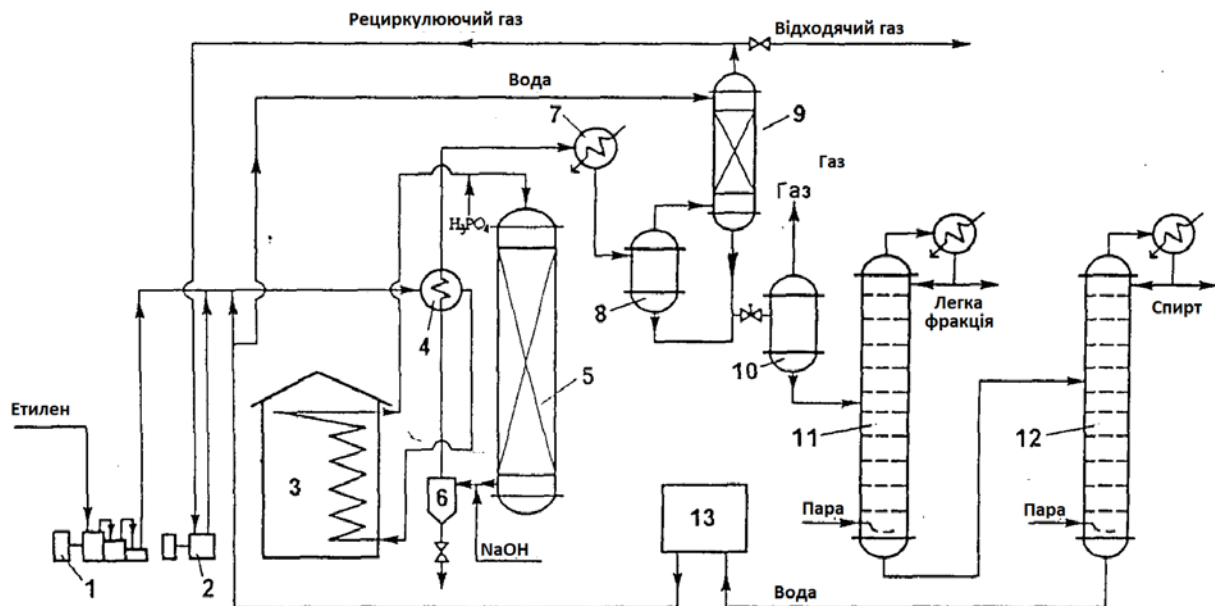


Паралельно з основною реакцією протікають ще й побічні реакції:



Утворення побічних продуктів призводить не тільки до забруднення етилового спирту, але й до втрат сировини, цільового продукту та значно зменшує строк служби каталізатора.

За звичайних температур лише незначна кількість етанолу може перебувати у газовій фазі, а збільшення температури призведе до зменшення його концентрації. Вирівняти рівновагу реакції можна, застосувавши принцип Ле Шательє – Брауна, збільшивши тиск у реакційній суміші і зменшивши кількість молекул в системі. Вважається, що оптимальними умовами для проведення взаємодії є температура 250-300 °C і тиск 6,1-7,1 МПа. Схему виробництва етанолу можна бачити на рис. В.1.



- 1,2 - компресори; 3 - трубчаста піч; 4 - теплообмінник; 5 - реактор;
 6 - солевідділювач; 7 - холодильник; 8, 10 - сепаратори; 9 - абсорбер;
 11 - колона відгону легкої фракції; 12 - етанольна колона;
 13 - установка іонообмінного очищення оборотної води

Рис. В.1. Технологічна схема отримання етилового спирту

Опис технології отримання етанолу безкислотним методом

Розглянемо основні стадії технологічного процесу.

1. Підігрів суміші

Свіжий і оборотний етилен стискають в компресорах 1,2 до тиску в 8МПа та змішують з водяною парою, підігрівають в теплообміннику 4 теплом, що відходить від реактора і перегрівають в трубчастій печі 3 до 275 °С, після чого подають в реактор-гідрататор 5. Перед надходженням в реактор в потік вприскується фосфорна кислота для підживлення каталізатора, що продовжує термін його служби.

2. Синтез

Реактор являє собою порожню колону висотою 10м і діаметром 1,5 м, що працює в режимі ідеального витіснення. Для виключення впливу корозії від фосфорної кислоти зсередини він викладений листами червоної міді.

Реакційні гази містять пари вихідної фосфорної кислоти, яка нейтралізується гідроксидом натрію, а утворюються солі виділяються в солевідділювачі 6. Винесення фосфорної кислоти становить 0,4-0,5 т / год з 1 м³ каталізатора.

3. Виділення етанолу

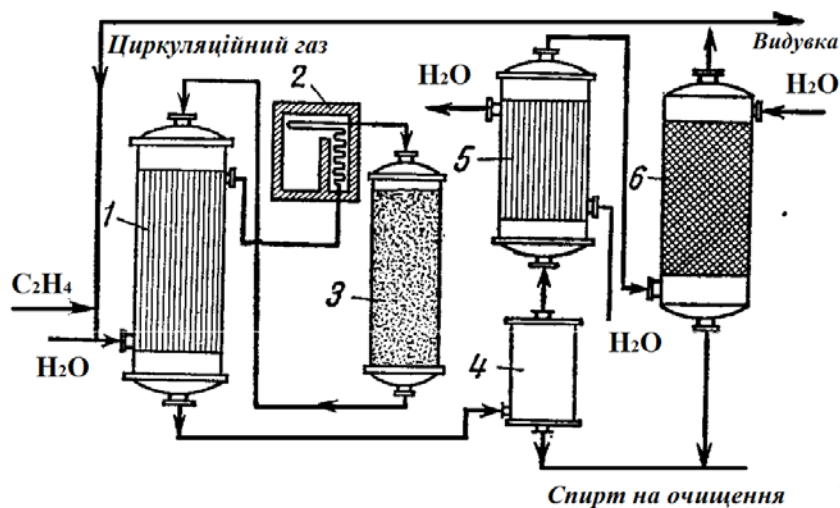
Теплота вихідних реакційних газів регенерується в теплообміннику 4 для нагріву входить суміші. У холодильнику 7 відбувається конденсація продуктів реакції, а в сепараторі 8 поділяються рідкі і газові потоки. Вода, як менш летючий компонент, конденсується з більшою повнотою. Тому для додаткового виділення спирту проводиться його відмивання водою в абсорбері 9. Непрореагований газ, що містить 90-92% етилену, рециркулюють компресором 2, а частина його скидають, щоб уникнути накопичення домішок в системі. Віддувка становить приблизно 20% від введеного етилену і направляється на установку газорозділення для виділення етилену.

Водний конденсат після сепаратора 8 і рідина з абсорбера 9 дроселюють (скидають тиск), в результаті чого виділяються розчинені гази, відокремлюються в сепараторі низького тиску 10 і направляються в паливну лінію.

Рідка фаза з сепаратора 10 являє собою 5%-й водний розчин етанолу, що містить домішки діетилового ефіру, ацетальдегіду і низькомолекулярних полімерів етилену. Цей розчин піддають ректифікації в ректифікаційних колонах 11 і 12. У першій відганяють найбільш летючий діетиловий ефір і ацетальдегід, а в другій – етиловий спирт у вигляді азеотропної суміші, що містить 95% етанолу і 5% води. Обігрів колони здійснюється гострою парою. У кубі колони 12 залишається вода, яку очищують від солі в іонообмінній установці 13 і повертають на гідратацію, організовуючи замкнутий цикл по технологічній воді. Це дозволяє значно знизити витрату свіжої води, припинити скидання відпрацьованої води в стоки і скоротити втрати етанолу.

При необхідності отримання безводного спирту етанол - ректифікат направляють в дегідратор. Витрата етилену на виробництво 1 т етилового спирту становить 0,7 т (теоретичний видатковий коефіцієнт 0,61 т етилену). У структурі собівартості спирту 30% припадає на вартість сировини. Спрощена схема виробництва етилового спирту представлена на рис. В.2. Суміш стиснутих компресором етилену, циркуляційних газів і води приходить в теплообмінник 1, трубчасту піч 2, нагрівається до 280°C і поступає в контактний апарат – гідратор (циліндрична колона висотою в 10 метрів, діаметр 2.5 метра та викладеною зсередини червоною міддю), заповненою каталізатором на висоту 8.5 метра. Парогазова суміш, виходячи з гідратора, нейтралізується лугом і попадає в теплообмінник 1, утворюється конденсат який збирається в збірнику 4, в холодильнику 5 продовжує охолоджуватися, потім в сепараторі 6 відділяють етилен, повертають в процес як циркуляційний газ, попередньо виділивши з нього 20% газів через потік видувки.

Оскільки при розробці та вдосконаленні виробництва етанолу можливі різні варіанти реалізації процесу, варто зазначити, що може знадобитись дослідження та оцінювання різних варіантів схеми та їх властивостей. Тому треба зробити можливими комп'ютерні дослідження на базі сучасних програм симуляторів (див. розділ 5 та додаток Б). Спершу треба розглянути структурні особливості пропонованої схеми (рис. В.2).



1 – теплообмінник; 2 – трубчаста піч; 3 – реактор; 4 – сепаратор;
5 – холодильник; 6 – сепаратор

Рис. В.2. Спрощений варіант технологічної схеми отримання етилового спирту

Аналіз структури ХТС

Всього схема налічує 13 основних потоків та 2 рецикли. Наявність рециклів передбачає проведення структурного аналізу ХТС, яка відображена графом на рис. В.3.

Виконуємо структурний аналіз у відповідності із алгоритмом, описаним у розділі 4 і визначимо послідовність розрахунку схеми. Розрахунки будемо проводити в середовищі Matlab.

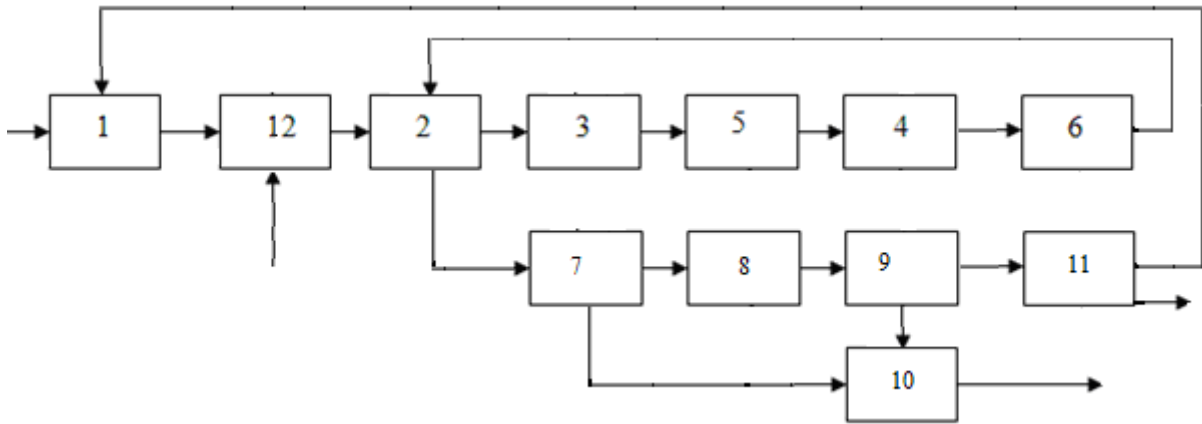


Рис. В.3. Граф схеми одержання етанолу

1. Спершу складаємо матрицю суміжності A для нашого графа (рис. В.3).

0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Далі за алгоритмом виконуємо дії послідовного піднесення матриці суміжності до n -го степеню (n дорівнює кількості вершин графа) та виконаємо операцію логічного додавання отриманих степенів:

$$C = A | A^2 | A^3 | A^4 | A^5 | A^6 | A^7 | A^8 | A^9 | A^{10} | A^{11} | A^{12}$$

Отримаємо матрицю шляхів **C**:

1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Після цього знайдемо матрицю **D**, елементи якої вказують на наявність комплексів у схемі.

>>**D=C' &C**

1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1
0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1
1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	1	1

Отже із матриці **D** видно, що в схемі є лише один комплекс, який складається з 11 елементів.

- Наступний крок – це визначення попередньої послідовності розрахунку схеми, що виглядає наступним чином:

$$\text{ППРС} = (K, 10), \text{ де } K=(1,12,2,3,5,4,6,7,8,9,11).$$

- Далі в отриманому комплексі треба визначити контури, що його утворюють. Формуємо список суміжності (табл. В.1) для визначення контурів комплексу.

Таблиця В.1

Список суміжності комплексу

Номера вершин, що утворюють дужки комплексу											
1	12	2	3	5	4	6	2	7	8	9	11
12	2	3	5	4	6	2	7	8	9	11	1

Будуємо прадерево для комплексу (рис. В.4).

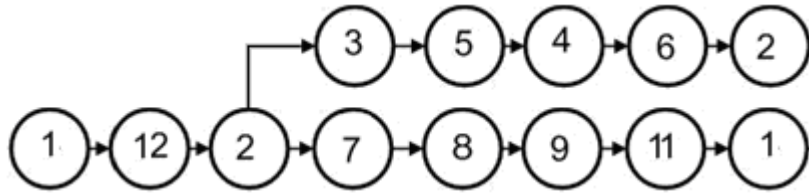


Рис. В.4. Прадерево комплексу.

Як можна бачити із структури дерева, комплекс складається з 2-х контурів (перелік за вершинами контуру):

- (1-12-2-7-8-9-11-1);
- (2-3-5-4-6-2)

Далі складаємо матрицю контурів (табл. В.2). Оскільки в нашому випадку параметричність потоків в подальших розрахунках схеми буде однаковою, рядок p можна не заповнювати, а лише підрахувати рядок f , за яким і будемо обирати дужки для розриву.

Таблиця В.2

Матриця контурів комплексу

№	1-12	2-3	3-5	5-4	4-6	6-2	2-7	7-8	8-9	9-11	11-1	12-2
I	1	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1
II	0	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0
f	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
p												

Оскільки всі значення $f = 1$, то це означає, що контури не мають спільних дужок і тому кожний з них може бути розірваний будь якою із дужок, що його утворюють. Визначаємо оптимальну множину розриваємих дужок (ОМРД). Для розриву оберемо дужки (6-2) та (2-7).

$$\text{ОМРД} = \{(6-2), (2-7)\}$$

4. На основі ППРС визначимо остаточну або обчислювальну послідовність схеми ОПРС (рис. В.5).

$$\text{ОПРС} = (7-8-9-11-1-12-2-3-5-4-6-10)$$

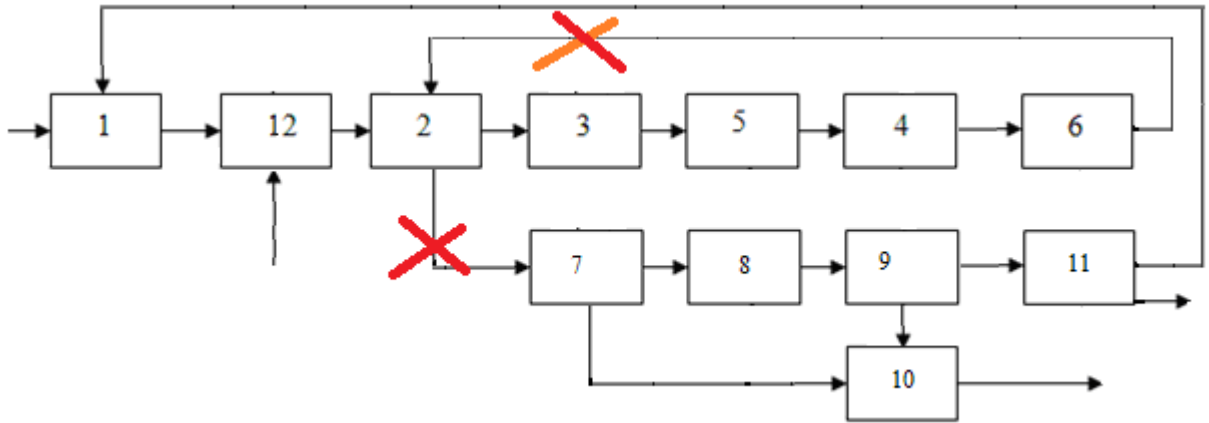


Рис. В.5. Структура ХТС із розриваними потоками

Структурний аналіз схеми виконано, можна приступити до її розрахунку. Для розрахунків обираємо програму-симулятор Chemcad 6.3.1 (дивись Додаток Б).

Розрахунок ХТС із використанням програми Chemcad

Спершу в середовищі Chemcad збираємо нашу схему для процесу синтезу етанолу. Для даного процесу необхідно задати вхідні та вихідні потоки для подачі сировини та відведення продуктів. Також треба задати апарати: змішувачі, кожухотрубний теплообмінник, трубчаті пічі, ректори, сепаратор та холодильник. Всі апарати треба з'єднати між собою проміжними потоками. Дані апарати ми можемо знайти на палітрі інструментів (рис. В.6).

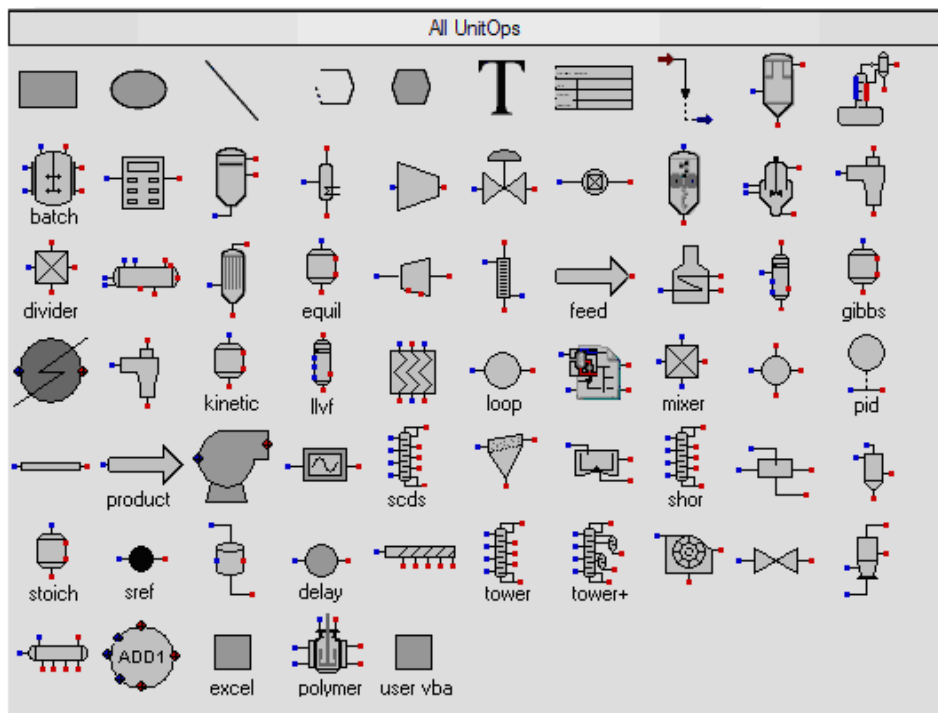


Рис. В.6. Елементи палітри інструментів для складання схеми процесу

Налаштувавши усі потоки (табл. В.3) та обравши необхідні апарати отримуємо схему процесу, яка зображена на рис. В.7.

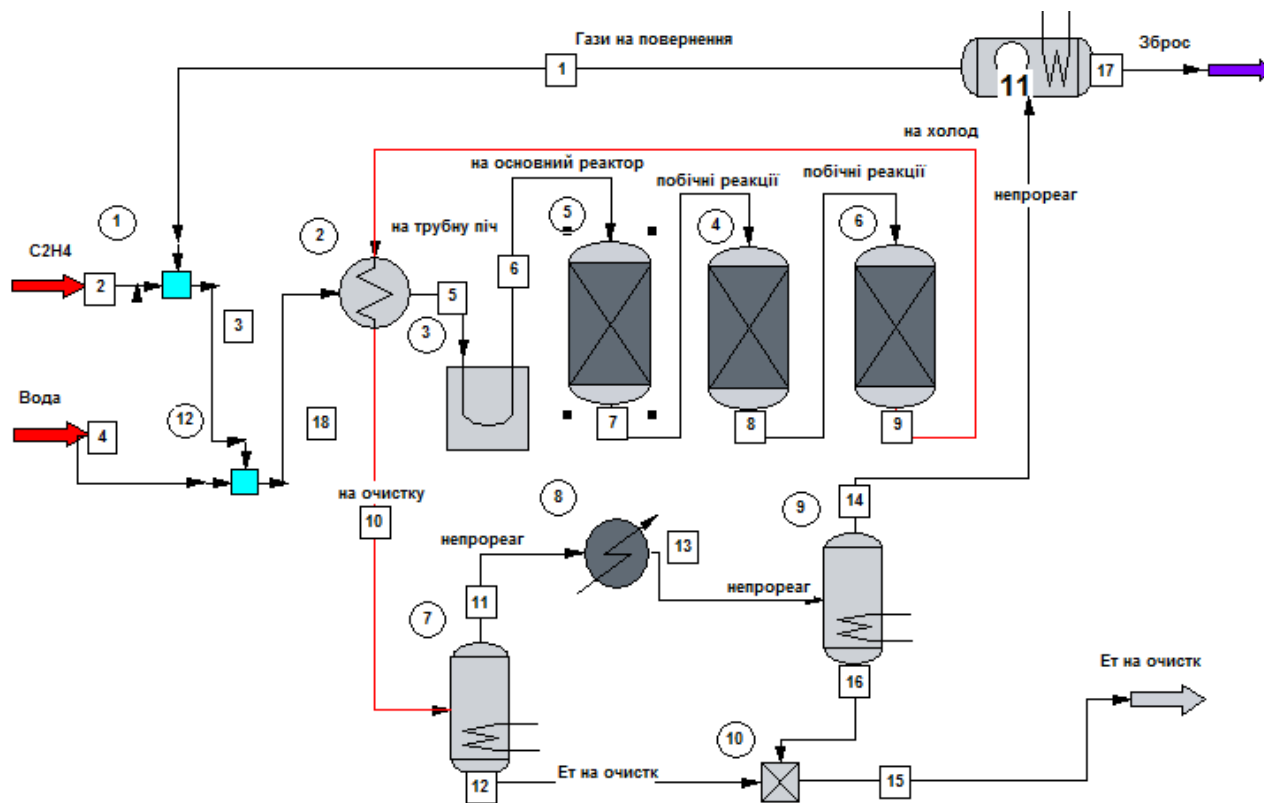


Рис. В.7. Схема синтезу етанолу в середовищі Chemcad

Таблиця В.3

Компоненти ХТС одержання етанолу.

№ п/п	Назва компоненту	Хімічна формула
1	Етан	C_2H_6
2	Етен	C_2H_4
3	Вода	H_2O
4	Етанол	C_2H_5OH
5	Ацетальальдегід	C_2H_5O
6	Діетиловий ефір	$C_4H_{10}O$
7	Водень	H_2

При додаванні апаратів та потоків схеми середовище Chemcad надає їм автоматично номери, які можна бачити на схемі (рис. В.7). Відобразити топологію схеми можна ще й в вигляді таблиці (табл. В.4). Схожу таблицю можна отримати у меню *Report* (Звіти).

Вхідні та вихідні потоки апаратів схеми

№	Назва	Ім'я відповідних моделей в програмі-симуляторі	Вхідні потоки	Вихідні потоки
1	Змішувач етену	1	1,2	3
2	Теплообмінник	2	4	5
3	Трубчата піч	3	5,9	6,10
4	Основний реактор	5	6	7
5	Побічний реактор-1	4	7	8
6	Побічний реактор-2	6	8	9
7	Первинний сепаратор	7	10	11,12
8	Холодильник	8	11	13
9	Вторинний сепаратор	9	13	14,16
10	Змішувач етанолу	10	12,16	15
11	Сепаратор збросу	11	14	3,17
12	Змішувач води	12	4,3	18

Для роботи схеми кожен апарат потрібно налаштувати. Також задати вхідні та вихідні потоки, концентрації речовин, режими роботи апаратів, тиск, тощо. Таблиця з вхідними потоками зображена на рис. В.8, де ми задали витрати речовин, які надходять в схему. Для отримання етанолу в реакторі потрібно задати наступні характеристики (рис. В.9).

Крім основної реакції в реакторі відбуваються побічні реакції, а саме утворення ацетатальдегіду та диетилового ефіру. Для того, щоб врахувати ці реакції, в схему необхідно додати ще два реактора для побічних реакцій та налаштувати їх (рис. В.10).

Після того, як етанол отримано, потік з продуктом треба спочатку охолодити, а потім виділити етанол та компоненти, що не прореагували. Дана процедура відбувається в первинному сепараторі (рис. В.11). Після чого частина продукту потрапляє на подальше доочищення від побічних продуктів реакції, а непрореаговані компоненти та етанол, який не відділився при первинній сепарації, потрапляє на вторинний сепаратор і далі на доочищення, а вода, етан, етен та водень, що не прореагували направляються повторно в реактор. При цьому після вторинної сепарації з газу видаляється 20 відсотків газу для подальшого очищення.'

Stream No.	2	4
Stream Name	C2H4	Вода
Temp K	353.15	293.15
Pres Pa	8000000	100000
Vapor Fraction	1	0
Enthalpy MJ/h	439676.2	-945978
Total flow	9000	3303
Total flow unit	kmol/h	kmol/h
Comp unit	kmol/h	kmol/h
Water	0	3303
Ethene	8820	0
Ethane	180	0
Hydrogen	0	0
Ethanol	0	0
Acetaldehyde	0	0
Diethyl Ether	0	0

Рис. В.8. Вхідні потоки

ID: 5

Specify Thermal Mode:

1. Adiabatic
 2. Isothermal C
 3. Heat Duty MJ/h

Key Component

Frac. Conversion

Heat of Reaction J/kmol

Reactor Pressure Pa

Calc H of Reac. J/kmol

Ideal gas state

Stoichiometric Coefficients:

Water	<input type="text" value="-1"/>	Hydrogen	<input type="text"/>	Diethyl Ether	<input type="text"/>
Ethene	<input type="text" value="-1"/>	Ethanol	<input type="text" value="1"/>		
Ethane	<input type="text"/>	Acetaldehyde	<input type="text"/>		

Рис. В.9. Налаштування реактора синтезу етанолу

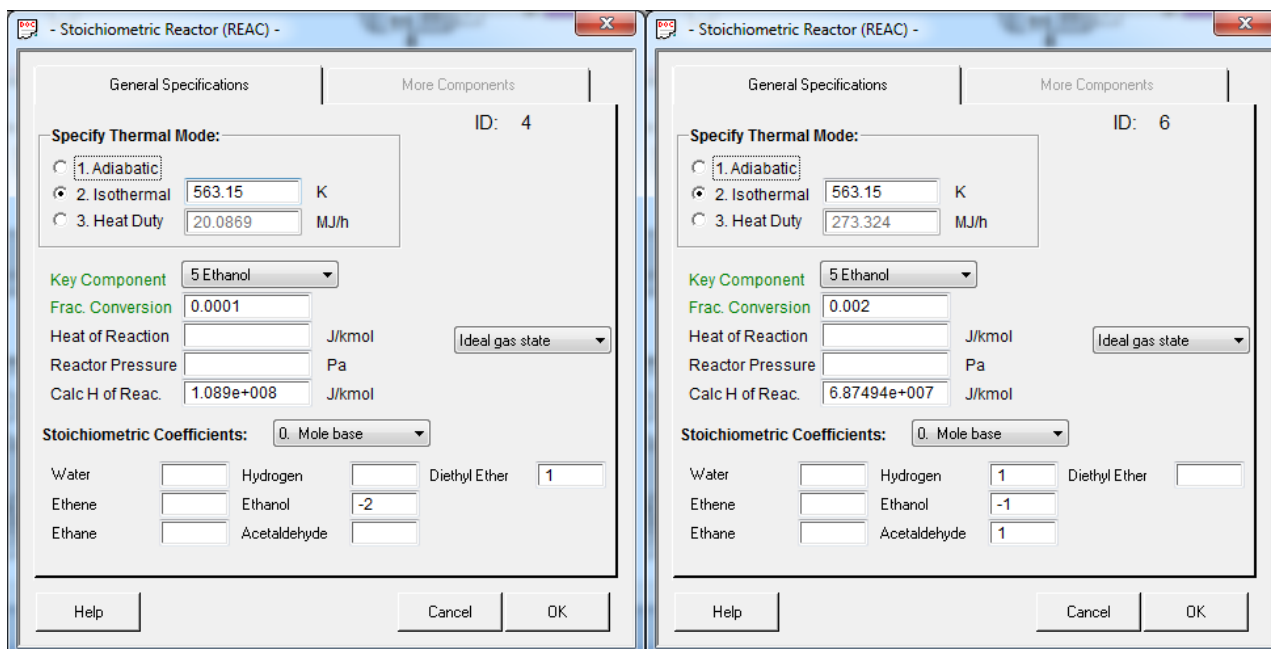


Рис. В.10. Налаштування реакторів для побічних реакції

0 Specify temperature		Specification	90	C
Pressure out		Pa	Pressure drop	
		Pa		Pa
Split basis:	0 Split fractions			
Split destination:	0 Specifications (below) refer to top product			
Split Fractions				
Water	0.9	Acetaldehyde		
Ethene	1	Diethyl Ether		
Ethane	1			
Hydrogen	1			
Ethanol	0.6			

Рис. В.11. Налаштування первинного сепаратора

Після того, як схему повністю складено, задано склад вхідних потоків (див. табл. В.3) та специфікації обладнання можна приступити до її розрахунку. Використовуючи меню ChemCad, задаємо режим, в якому запускаємо технологічну схему процесу на розрахунок (рис. В.12).

Запуск вважається вдалим, якщо не з'явиться ніяких вікон із попередженнями та помилками. Якщо розрахунок схеми завершено (отримали повідомлення про збіжність процесу розрахунку), то можна переглянути його результати. Переглянути результати роботи можна через меню звітів (*Report*). Для цього в меню *Report* (рис. В.13) потрібно вибрати необхідний звіт.

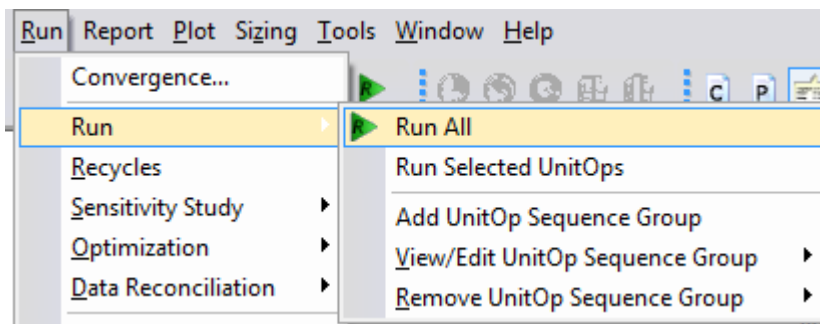


Рис. В.12. Запуск процесу моделювання

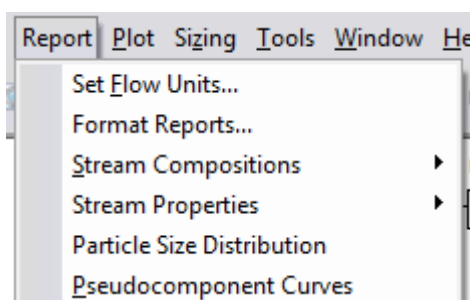


Рис. В.13. Меню звітів

Оберемо наступні звіти:

- *Topology*;
- *Thermodynamics*;
- *Flow Summaries*;
- *Mass Balance*.

Лістинг звіту із топології схеми зображено на рис. В.14. Він відображає, який вхідні та вихідні потоки кожного апарату, також схему всіх з'єднань по потоках. Звіт з термодинаміки зображений на рис. В.15. Звіт по вхідним та вихідним потокам схеми представлений на рис. В.16.

Матеріальний баланс по апаратах наведений в таблицях В.5-В.8.

Звіт по загальному балансу схеми можна, отриманий в середовищі Chemcad, зображено на лістингу (рис. В.17). Звіт по енергетичному балансу зображений на рис. В.18.

Simulation: ethanolv2

Date: 11/24/2016 Time: 10:43:45

FLOWSHEET SUMMARY

Equipment	Label	Stream Numbers
1	MIXE	1 2 -3
2	HTXR	18 9 -5 -10
3	HTXR	5 -6
4	REAC	7 -8
5	REAC	6 -7
6	REAC	8 -9
7	CSEP	10 -11 -12
8	HTXR	11 -13
9	CSEP	13 -14 -16
10	MIXE	12 16 -15
11	CSEP	14 -1 -17
12	MIXE	3 4 -18

Stream Connections

Stream	Equipment		Stream	Equipment		Stream	Equipment	
	From	To		From	To		From	To
1	11	1	7	5	4	13	8	9
2		1	8	4	6	14	9	11
3	1	12	9	6	2	15	10	
4		12	10	2	7	16	9	10
5	2	3	11	7	8	17	11	
6	3	5	12	7	10	18	12	2

Рис. В.14. Топологія схеми

Simulation: ethanolv2

Date: 11/24/2016 Time: 10:46:15

COMPONENTS

	ID #	Name	Formula
1	62	Water	H2O
2	22	Ethene	C2H4
3	3	Ethane	C2H6
4	1	Hydrogen	H2
5	134	Ethanol	C2H6O
6	128	Acetaldehyde	C2H4O
7	162	Diethyl Ether	C4H10O

THERMODYNAMICS

K-value model : Raoult's Law (Ideal Vapor Pressure)
 Enthalpy model : SRK
 Liquid density : Library

Std vapor rate reference temperature is 0 C.
 Atmospheric pressure is 101324.9793 Pa.

Рис. В.15. Термодинаміка схеми

Simulation: ethanolv2

Date: 11/24/2016 Time: 11:03:07

FLOW SUMMARIES:

Stream No.	2	4	15	17
Stream Name	C2H4	Вода	Ет на очистк	Зброс
Temp K	353.1500*	293.1500*	357.6316	293.1500
Pres Pa	7999999.6228*	100000.0000*	100000.0000	100000.0000
Enth MJ/h	15709.	-52511.	-29202.	-8936.0
Vapor mole frac.	1.0000	0.00000	0.078907	0.78979
Total kmol/h	320.3797	183.3472	107.5272	330.7825
Total kg/h	9000.0000	3303.0001	3775.6971	8531.0120
Total std L m3/h	25.7051	3.3030	4.5483	21.8365
Total std V m3/h	7180.88	4109.48	2410.08	7414.04
Flowrates in kg/h				
Water	0.0000	3303.0001	756.8631	1362.3526
Ethene	8820.0000	0.0000	0.0000	6987.6600
Ethane	180.0000	0.0000	0.0000	180.8672
Hydrogen	0.0000	0.0000	0.0000	0.1320
Ethanol	0.0000	0.0000	3010.6354	0.0000
Acetaldehyde	0.0000	0.0000	5.7693	0.0000
Diethyl Ether	0.0000	0.0000	2.4293	0.0000

Рис. В.16. Звіт по потоках

Таблиця В.5

Матеріальні баланси по реакторах

№ компоненту	Компонент	Основний реактор		Побічний реактор-1		Побічний реактор-2	
		Вхід	Вихід	Вхід	Вихід	Вхід	Вихід
		Потік 6	Потік 7	Потік 7	Потік 8	Потік 8	Потік 9
1	Етан	903	903	903	903	903	903
2	Етен	36700	34932	34932	34932	34932	34932
3	Вода	8752	7571	7571	7571	7571	7571
4	Етанол	0	3019	3019	3016	3016	3010
5	Ацетальальдегід	0	0	0	0	0	5,8
6	Діетиловий ефір	0	0	0	3	3	3
7	Водень	0	0	0	0	0	0,2
	Сума	46426	46426	46426	46426	46426	46426

Таблиця В.6

Матеріальні баланси по змішувачах

№ компоненту	Компонент	Змішувач етену			Змішувач води		
		Вхід		Вихід	Вхід		Вихід
		Потік 1	Потік 2	Потік 3	Потік 3	Потік 4	Потік 18
1	Етан	723	180	903	903	0	903
2	Етен	27950	8820	36770	36770	0	36700
3	Вода	5449	0	5149	5149	3303	8752
	Сума		9000			3303	46426

Таблиця В.7

Матеріальні баланси по сепараторам

№ компоненту	Компонент	Первинний сепаратор			Вторинний сепаратор		
		Вхід	Вихід		Вхід	Вихід	
		Потік 10	Потік 11	Потік 12	Потік 13	Потік 16	Потік 14
1	Етан	903	903	0	903	0	903
2	Етен	34932	34932	0	34932	0	34932
3	Вода	7571	6681	757	6681	0	6681
4	Етанол	3010	1806	1204	1806	1806	0
5	Ацетальальдегід	5,8	0	5,8	0	0	0
6	Діетиловий ефір	3	0	3	0	0	0
7	Водень	0,2	0,2	0	0,2	0	0,2
	Сума	46426	44322,2	1969,8	44322,2	1806	42516,2

Таблиця В.8

Матеріальні баланси по сепаратору збросу та змішувачу етанолу

№ компоненту	Компонент	Сепаратор збросу			Змішувач етанолу		
		Вхід	Вихід		Вхід	Вихід	
		Потік 14	Потік 17	Потік 1	Потік 12	Потік 16	Потік 15
1	Етан	903	180	723	0	0	0
2	Етен	34932	6988	27950	0	0	0
3	Вода	6681	1362	5449	757	0	757
4	Етанол	0	0	0	1204	1806	3010
5	Ацетальальдегід	0	0	0	5,8	0	5,8
6	Діетиловий ефір	0	0	0	3	0	3
7	Водень	0,2	0,2	0	0	0	0
	Сума	42516,2			1969,8	1806	

	kmol/h		kg/h	
	Input	Output	Input	Output
Water	183.347	117.636	3303.000	2119.216
Ethene	314.394	249.079	8820.000	6987.660
Ethane	5.986	6.015	180.000	180.867
Hydrogen	0.000	0.065	0.000	0.132
Ethanol	0.000	65.351	0.000	3010.636
Acetaldehyde	0.000	0.131	0.000	5.769
Diethyl Ether	0.000	0.033	0.000	2.429
Total	503.727	438.310	12303.000	12306.709

Рис. В.17. Загальний матеріальний баланс схеми синтезу етанолу

Overall Energy Balance	MJ/h	
	Input	Output
Feed Streams	-36801.4	
Product Streams		-38138
Total Heating	29301	
Total Cooling	-30689	
Power Added	0	
Power Generated	0	
Total	-38189.4	-38138

Рис. В.18. Енергетичний баланс процесу синтезу етанолу

З представлених звітів по матеріальних та енергетичних балансів видно, що загальний баланс входу має невелику похибку. Крім того, в процесі моделювання було встановлено, що використовуючи рецикл та ефективні системи ректифікації, кінцевий вихід продукту може становити майже 96%.

Це свідчить про коректність розрахунків й те, що в контексті загальної стратегії розробки, яку надано в розділі 4.6 запропонований варіант схеми може розглядатись як базовий при проектуванні виробництва синтезу етанолу. Цілком зрозуміло, що необхідно подальше оцінювання економічної та екологічної ефективності цього варіанту схеми. Засоби для такої оцінки також наявні в програмі Chemcad, як і в більшості програм-симуляторів.

В.2 Системний аналіз технологічної схеми окислювальної конденсації метану

Опис процесу окислювальної конденсації метану

У даному прикладі розглядається процес прямого каталітичного перетворення метану до етилену – окислювальної конденсації метану. Були досліджені механізми реакції та різні каталізатори.

Етилен C_2H_4 – органічна сполука, найпростіший і найважливіший представник ряду ненасичених вуглеводнів з одним подвійним зв'язком. Являє собою безбарвний газ із слабким приємним запахом, трохи легший від повітря, у воді малорозчинний, а в спирті й інших органічних розчинниках розчиняється добре. З повітрям етилен, як і метан, утворює вибухові суміші. Широкого застосування в Україні етилен набув у виробництві етилового спирту, поліетилену, полівінілхлориду, синтетичного каучуку та інших галузях.

Сировиною для виробництва етилену є етиловий спирт, природний газ або виділена з нього метанова фракція, а останнім часом - ацетилен. Основні способи отримання:

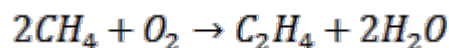
1. Каталітична дегідратація етилового спирту. В якості каталізатора дегідратації етилового спирту зазвичай застосовується окис алюмінію, робоча температура реакції знаходиться в межах 250-400 °С. Процес проводиться в реакторі, обладнаному сорочкою для обігріву. Обігрів проводиться парами ртуті. Газ, що виходить з реактора, охолоджується, сушиться і піддається низькотемпературній ректифікації. В результаті виходить дуже чистий етилен.
2. Часткове гідрування ацетилену при атмосферному або злегка підвищеному тиску. Вихідний ацетилен не повинен містити домішки, що отруюють каталізатор. Перед переробкою ацетилен піддається очищенню на промивних установках, які зрошуються хлорною водою, потім промивається розведеним розчином лугу і сушиться. Водень також не повинен містити контактних отрут. Реактори гідрування, з'єднані в батареї, мають всередині решітки, на яких розміщується каталізатор, паладій на двоокисі кремнію. Спочатку суміш ацетилену і водню нагрівають до 200 °С; в процесі гідрування температура в реакторах підтримується в межах 180-230 °С за рахунок тепла реакції і регулюється зрошенням каталізатора водою. З поступовим старінням каталізатора, реактор у міру потреби нагрівають димовими газами. Газ, який виходить з реактора, має наступний склад: 80% парів і 20% газу, що містить 50-60% етилену, 3% етану, 3% азоту, 0,8% ацетилену і близько 30% водню. Після охолодження і відділення води, сирий етилен зріджують в роздільнику Лінде і піддають низькотемпературній дистиляції. Очищений продукт містить 94-96% етилену, 3-4% етану, приблизно 1% азоту і близько 0,5% ацетилену. Етилен, що отримується з ацетилену, для полімеризації не годиться. Він застосовується для виробництва стиролу.
3. При виробництві етилену з етан-пропанової фракції суміш обох вуглеводнів, до якої додають невелику кількість водяної пари, піддають короткочасній дії температури 750-800 °С. Реакційну суміш швидко охолоджують, гази конденсують, відокремлюють від води і піддають низькотемпературній ректифікації.
4. Часткове окислення етану повітрям або киснем при температурі 800 °С. Обидва гази перш за все нагрівають: етан до 650 °С, кисень до 550 °С, а потім змішують у відношенні 3:1 в невеликій камері змішання, звідки з великою швидкістю подають в основний апарат – камеру спалювання. Камера спалювання заповнена

кільцями Рашига, щоб змішання газів було найкращим. Завдяки короткому часу контактування знижується утворення вуглецю і формальдегіду. Газ, що відходить з камери спалювання, який містить приблизно 33% етилену, 26,3% водню, 14,1% етану, 11,5% окису вуглецю, 7,6% метану, 4,2% азоту, 1,1% пропану, 0,7% вуглекислого газу і 0,6% кисню, охолоджують водою, сушать і після скраплення, з метою очищення, піддають низькотемпературній дистиляції на роздільник Лінде. Регенований етан знову повертають на переробку. Вихід етилену за цим методом становить 80% від теоретичного.

Опис технологічної схеми

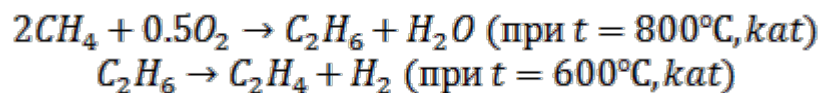
На даний момент метод прямого каталітичного перетворення метану до етилену – окислювальної конденсації метану не має широкої реалізації у промисловості.

Про проведення реакції окислювальної конденсації метану вперше повідомив Мітчелл в 1980 році. Ця реакція каталітична і протікає при температурах вище 700 °С. Процес може бути описаний рівнянням реакції:



$$\Delta H_{800^\circ\text{C}} = -514 \text{ кДж/моль } \text{CH}_4$$

Однак в дійсності реакція відбувається через утворення етану, який потім піддається дегідруванню:



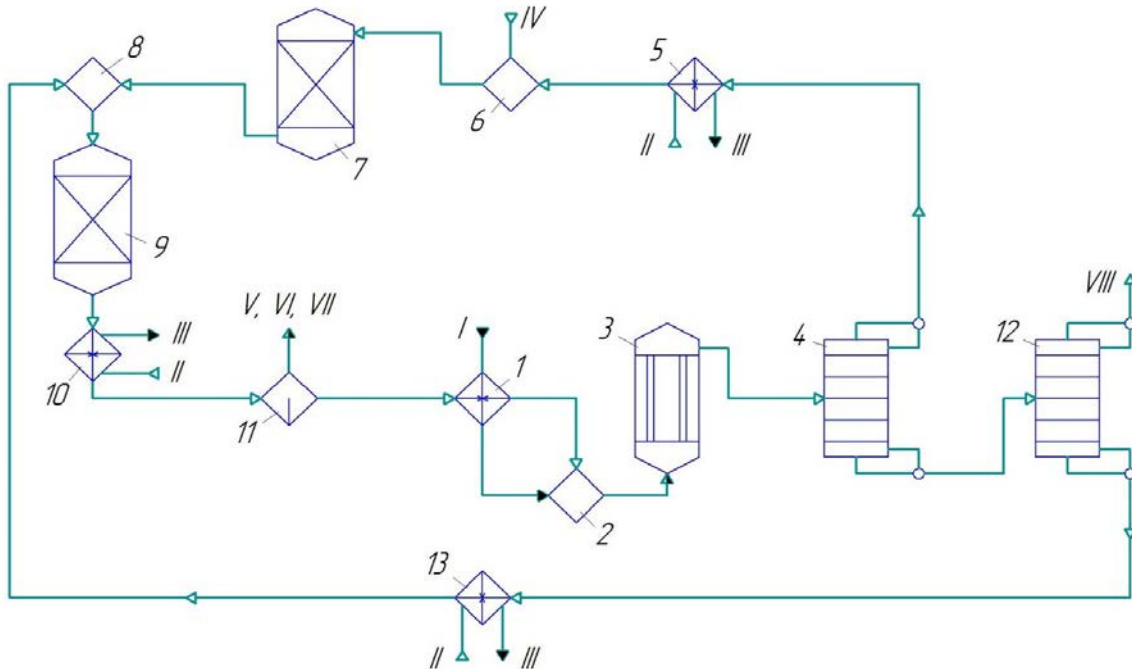
при цьому конверсія метану становить 20%.

Переробка метану за цією реакцією має наступні переваги:

- перетворення метану в етилен здійснюється в процесі однієї технологічної стадії на відміну від багатостадійного процесу парової конверсії метану з отриманням синтез-газу і наступному синтезу за реакцією Фішера-Тропша;
- етилен є основною сировиною нафтохімічного синтезу, з якого можна отримати широкий набір продуктів;
- реакція протікає при атмосферному тиску на відміну від синтезу Фішера-Тропша, що вимагає, як правило, підвищених тисків.

Варіант схеми процесу окислювальної конденсації метану зображений на рис. В.19. Зріджений природний газ через теплообмінник 1 надходить до змішувача 2, у якому непрореагований метан змішується зі свіжим. Далі суміш через випарник 3 поступає до деметанізатора, де метан виділяється з суміші газів і разом з новою порцією природного газу, проходячи через теплообмінник 5, подається в реактор 7. Туди ж, за допомогою змішувача 6, надходить кисень. Температура у реакторі становить 800 °С. Відбувається реакція окислювальної конденсації метану, після цього суміш надходить в реактор дегідрування етану 9, де використовується теплота реакції. Реакція відбувається за температури 600 °С. Суміш, проходячи теплообмінник 10, потрапляє до сепаратору 11, де відбувається виділення водню, води і вуглекислого газу. Далі суміш, нагріваючи свіжий метан своїм теплом у теплообміннику 1, після

деметанізатора надходить в колону виділення етилену. Непрореагований етан повертається в реактор дегідрування для перетворення його в етилен. Таким чином, завдяки рециркуляції (повторної подачі непрореагованої сировини) здійснюється повний замкнутий цикл отримання етилену з природного газу. Наявність рециклів в схемі, яка відображена на рис. В.19 потребує проведення структурного аналізу ХТС.



- 1, 5, 10, 13 – теплообмінники; 2, 6, 8 – змішувачі потоків; 3 – випарник;
 4 – деметанізатор; 7 – реактор окислювальної конденсації метану;
 9 – реактор дегідрування етану; 11 – сепаратор; 12 – колона виділення етилену.
 I – метан; II – пара; III – конденсат; IV – кисень; V – водень;
 VI – вода; VII – вуглекислий газ; VIII – етилен

Рис. В.19. Схема процесу окислювальної конденсації метану

Аналіз структури ХТС

Інформація по потоках та їх зв'язкам з апаратами схеми наведена у табл. В.9.

У схемі присутній один рецикл, коли надлишок суміші газів (етилену, непрореагованого етану та метану) із сепаратора 13 поступає до теплообмінника 1, де своїм теплом нагріває свіжий зріджений природний газ. Вхідними потоками схеми є потік свіжого зрідженого природного газу, що надходить до теплообмінника 1 та потік свіжого кисню, що надходить через змішувач 6 до реактора 7. Вихідними потоками є потік отриманого етилену, що виходить із сепаратора 12, а також потік суміші водню, вуглекислого газу та води із сепаратора 11.

Структура схеми

	<i>Назва</i>	Номер апарату у програмі ChemCad	<i>Вхідні потоки</i>	<i>Вихідні потоки</i>
	Теплообмінник	1	1;13	2;19
	Змішувач	2	2;19	3
	Випарник	3	3	4
	Сепаратор	4	4	5;16
	Теплообмінник	5	5	6
	Змішувач	6	6;7	8
	Реактор	7	8	9
	Змішувач	8	9;18	10
	Реактор	9	10	11
0	Теплообмінник	10	11	12
1	Сепаратор	11	12	13;15
2	Сепаратор	12	16	17;20
3	Теплообмінник	13	17	18

Структурна схема процесу окислювальної конденсації метану представлена у вигляді графу на рис. В.20.

Як і в попередньому прикладі, виконаємо структурний аналіз у відповідності із алгоритмом, описаним у розділі 4 та визначимо послідовність розрахунку схеми.

Розрахунки будемо проводити в середовищі Matlab.

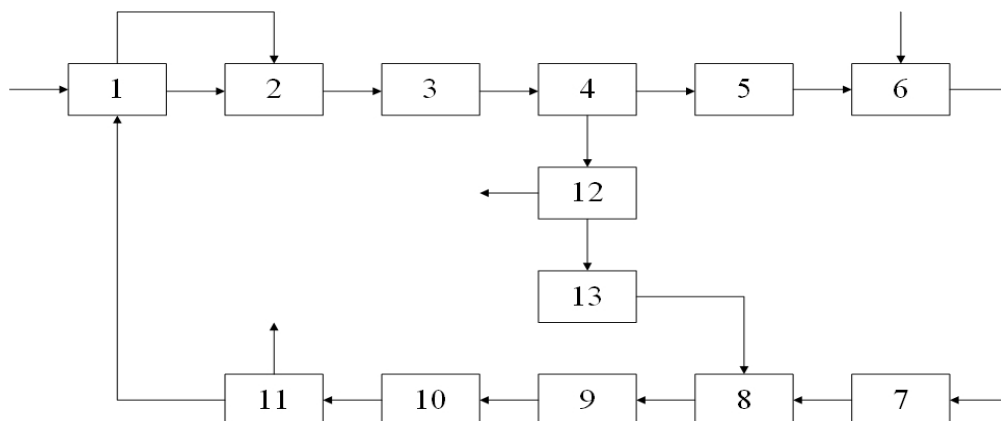


Рис. В.20. Структурна схема процесу окислювальної конденсації метану

Складемо матрицю суміжності **A**:

```
0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 1 0
0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1 0 0
1 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 1
0 0 0 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0
```

Далі отримаємо матрицю шляхів **C**:

>> **C=A| A^2| A^3| A^4| A^5| A^6| A^7| A^8| A^9| A^10| A^11| A^12| A^13**

```
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
```

Далі отримуємо матрицю **D**:

>> **D=C' & C**

```
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1
```

Однакові ненульові рядки матриці **D** вказують на вершини, що утворюють комплекси. З матриці **D** видно, що схема містить 1 комплекс, який містить всі її вершини:

$$K = [1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,13]$$

Попередня послідовність розрахунку схеми: ППРС = [K]. Формуємо список суміжності (табл. В.10), та будуємо прадерево комплексу.

Таблиця В.10

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
2	3	4	5,12	6	7	8	9	10	11	1	13	8

Далі визначаємо контури комплексу. Список контурів за вершинами:

- Контур 1: 1-2-3-4-5-6-7-8-9-10-11-1;
- Контур 2: 1-2-3-4-12-13-8-9-10-11-1.

Складемо матрицю контурів (табл. В.11).

Таблиця В.11

Матриця контурів

		Номери дуг													
		1-2	2-3	3-4	4-5	5-6	6-7	7-8	8-9	9-10	10-11	11-1	4-12	12-13	13-8
№ контуру	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0	0
	2	1	1	1	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1
	f	2	2	2	1	1	1	1	2	2	2	2	1	1	1

Максимальне значення ступеню контурності $f = 2$ мають 7 дуг (тобто вони є спільними для обох контурів), й можна розірвати будь-яку з них. Вирішуємо розірвати дугу (11-1) тобто оптимальна множина розриваємих дужок буде:

$$ОМРД = [(11-1)].$$

Тепер можна визначити остаточну послідовність розрахунку схеми (див. рис. В.22).

$$ОПРС = [1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 12, 13, 8, 9, 10, 11]$$

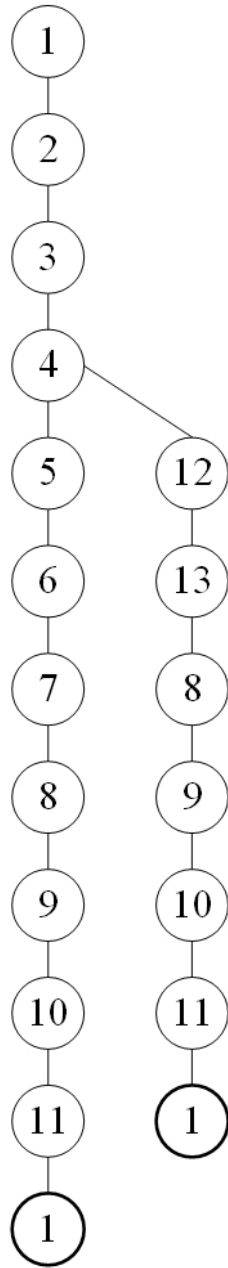


Рис. В.21. Прадерево комплексу

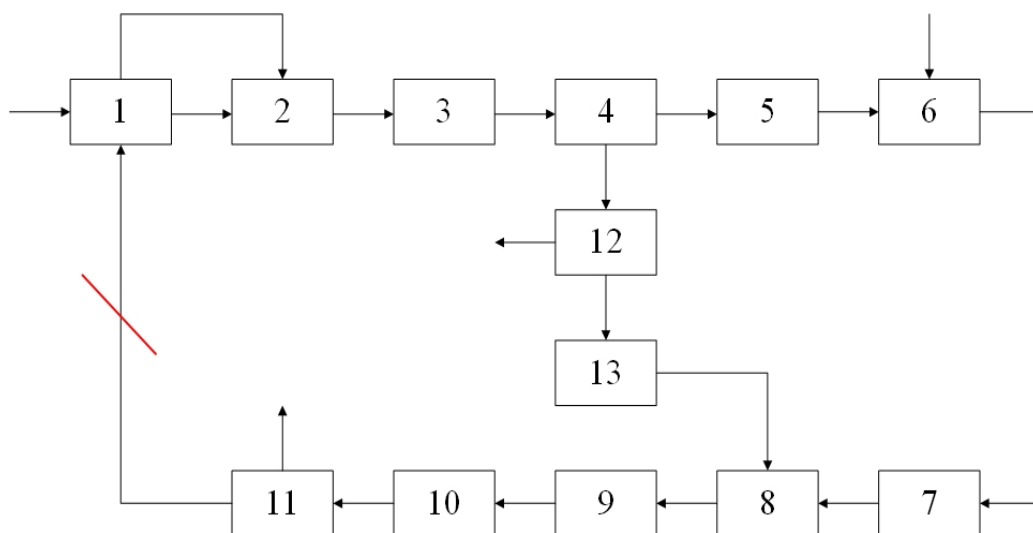


Рис. В.22. Розриви дуг на структурній схемі

Таким чином, структурний аналіз схеми процесу окислювальної конденсації метану показав, що ХТС має 1 комплекс, який складається із 2-х контурів, а також визначено послідовність розрахунку апаратів. Можна приступати до складання схеми у середовищі ChemCad та її моделювання.

Моделювання процесу у середовищі Chemcad

На початку роботи у моделюючій програмі ChemCad її потрібно налаштувати відповідно до своїх потреб.

1) Створюємо новий файл.

Для цього запускаємо програму ChemCad та у рядку меню натискаємо *File – New* (або *Ctrl+N*), після чого файл буде створений. Для його збереження у рядку меню натискаємо *File – Save As*. У вікні що з'явилося вводимо ім'я файлу – *Course_work_Shagan.ccb* та натискаємо клавішу *OK*.

2) Задаємо технічні розмірності.

Для цього у рядку меню натискаємо *Format – Engineering Units*. У спливаючому вікні обираємо розмірності одиниць із системи СІ (рис. В.23).

3) Обираємо компоненти (речовини), що використовуються у схемі.

Усі компоненти програми містяться у банку даних, доступ до якого можливий наступним чином: у рядку меню натискаємо *Thermophysical – Select Components*. Заносимо до нашого списку компоненти, що використовуватимуться при моделюванні, а саме: водень (*Hydrogen*), метан (*Methane*), етан (*Ethane*), етилен (*Ethylene*), вуглекислий газ (*Carbone Dioxide*), кисень (*Oxygen*) та вода (*Water*). Вікно компонентів зображене на рис. В.24.

4) Обираємо апарати для технологічної схеми.

У програмі ChemCad присутня велика бібліотека апаратів, що розташовується, як правило, праворуч від робочого поля (рис. В.25).

Технологічна схема процесу окислювальної конденсації метану містить 14 апаратів, 2 вхідних та 2 вихідних потоки. Складаємо схему у програмі ChemCad (В.26) у відповідності до технологічної схеми представленої на рис. В.19.

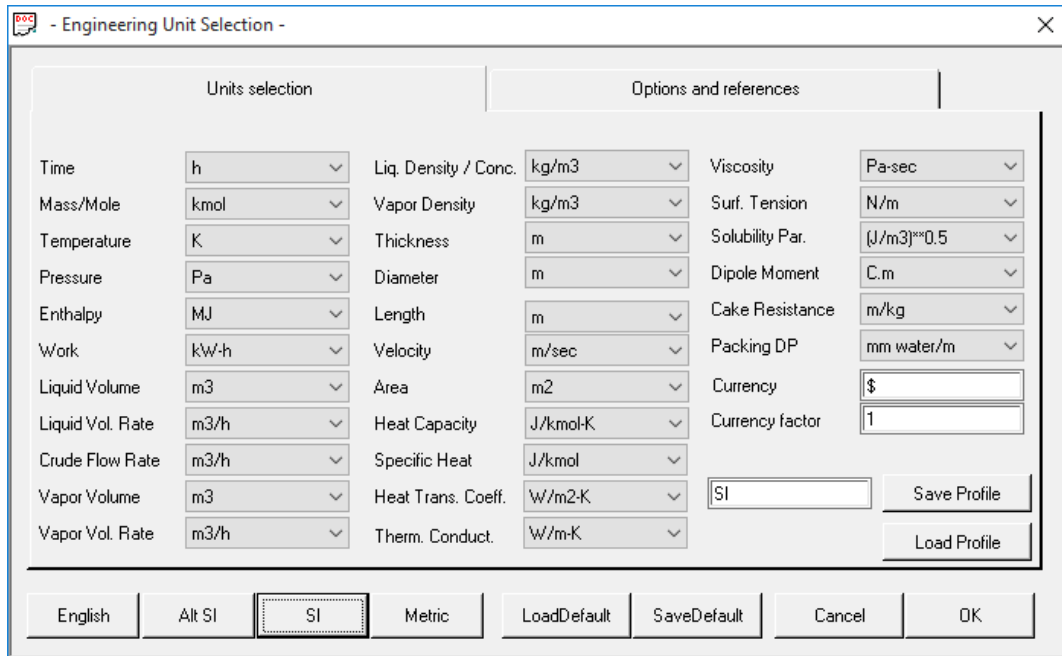


Рис. В.23. Вікно вибору розмірності одиниць

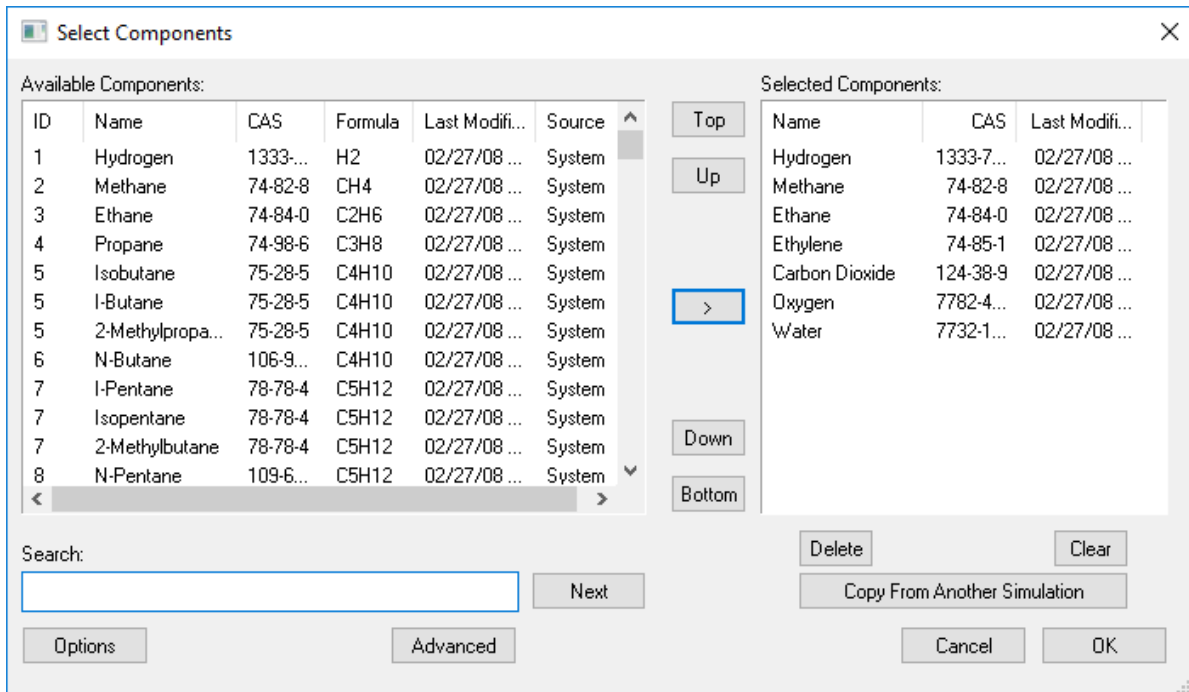


Рис. В.24. Вікно компонентів

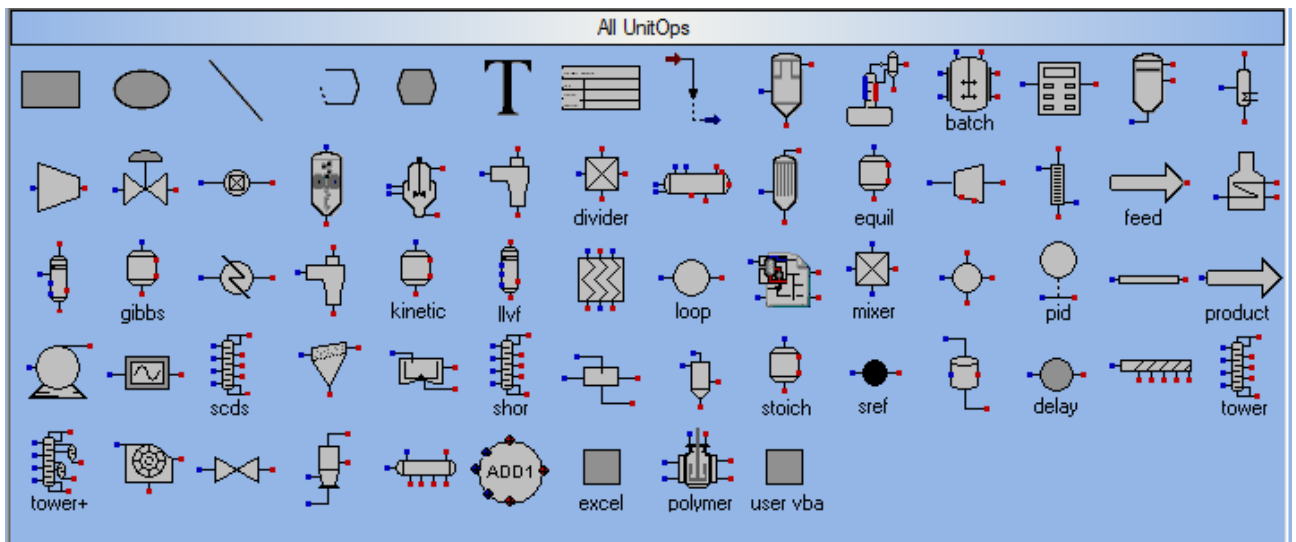


Рис. В.25. Бібліотека апаратів у ChemCad

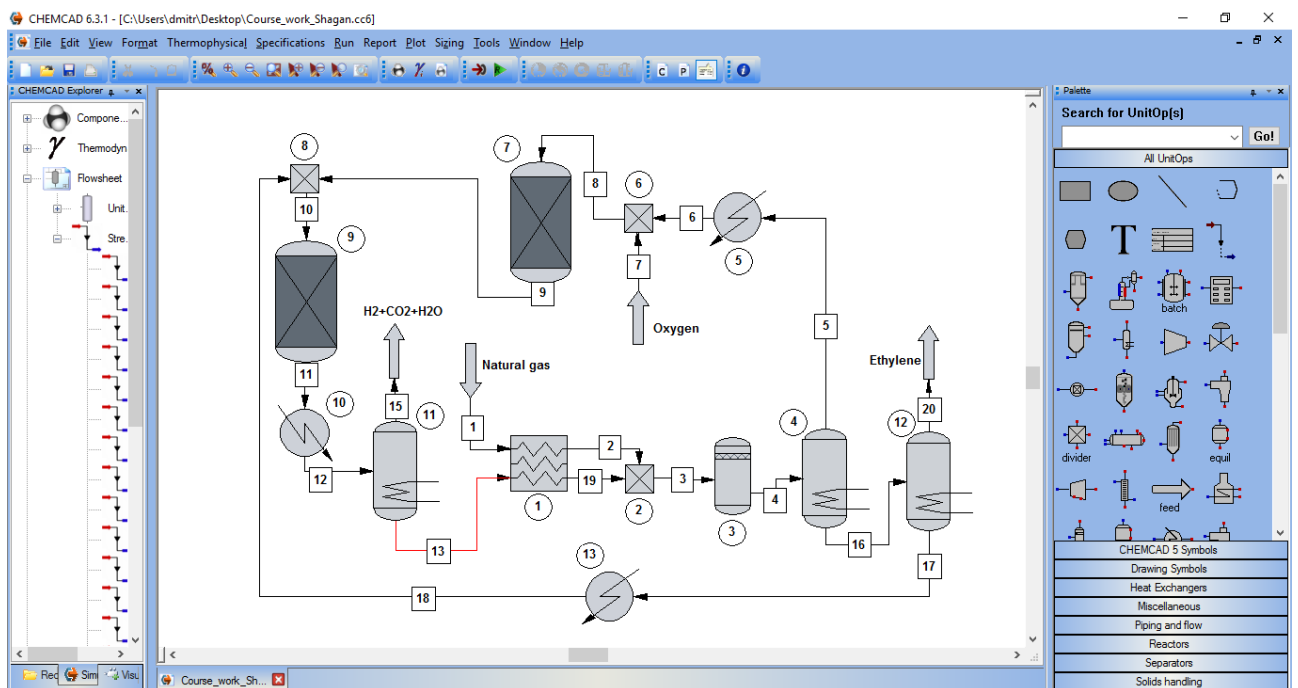


Рис. В.26. Схема процесу окислювальної конденсації метану складена у середовищі ChemCad 6.3.1

Вхідні потоки: природний газ (*Natural gas*); кисень (*Oxygen*).

Вихідні потоки: етилен (*Ethylene*); суміш водню, вуглекислого газу та води ($H_2+CO_2+H_2O$).

Використані апарати: 1, 5, 10, 13 – теплообмінники; 2, 6, 8 – змішувачі потоків; 3 – випарник; 4, 11, 12 – сепаратори; 7, 9 – реактори.

Для налаштування складеної схеми, необхідно задати вхідні потоки та налаштувати окремо кожен апарат. Визначимо вхідний потік 1 – зріджений природний газ (рис. В.27). У ньому задаємо поточну температуру, тиск у трубопроводі, а також витрату компонентів (у нашому випадку загальна масова витрата у кг/год).

Stream No.	1
Stream Name	Natural gas
Temp K	113
Pres Pa	101325
Vapor Fraction	0.9107727
Enthalpy MJ/h	-3586.085
Total flow	700
Total flow unit	kg/h
Comp unit	kg/h
Hydrogen	18
Methane	640
Ethane	21
Ethylene	0
Carbon Dioxide	21
Oxygen	0
Water	0

Рис. В.27. Налаштування параметрів вхідного потоку

На рис. В.28 зображено налаштування реактора, де вказано наступні налаштування: термічний режим – ізотермічний з температурою у реакторі 800 °С (1073 К); основний реагент – метан із ступенем перетворення 0,2. Також вказані стехіометричні коефіцієнти рівняння реакції. При налаштуванні випарника необхідно вказати температуру випаровування 0 °С (273 К), та тиск усередині випарника 101325 Па. На рис. В.29 представлено вікно налаштувань випарника.

Після налаштування параметрів усіх апаратів, потрібно запустити схему на розрахунок, натиснувши клавішу *Run All*. Інформацію кожного потоку можна переглянути, навівши курсором на протік. Приклад наведено на рис. В.30.

Для наочного відображення результатів у середовищі ChemCad використовуємо меню звіти, які можна сформулювати, якщо у рядку меню натиснути на пункт *Report* та обрати необхідний тип звіту. Лістинги звітів можна бачити у табл. В.12 – В.16.

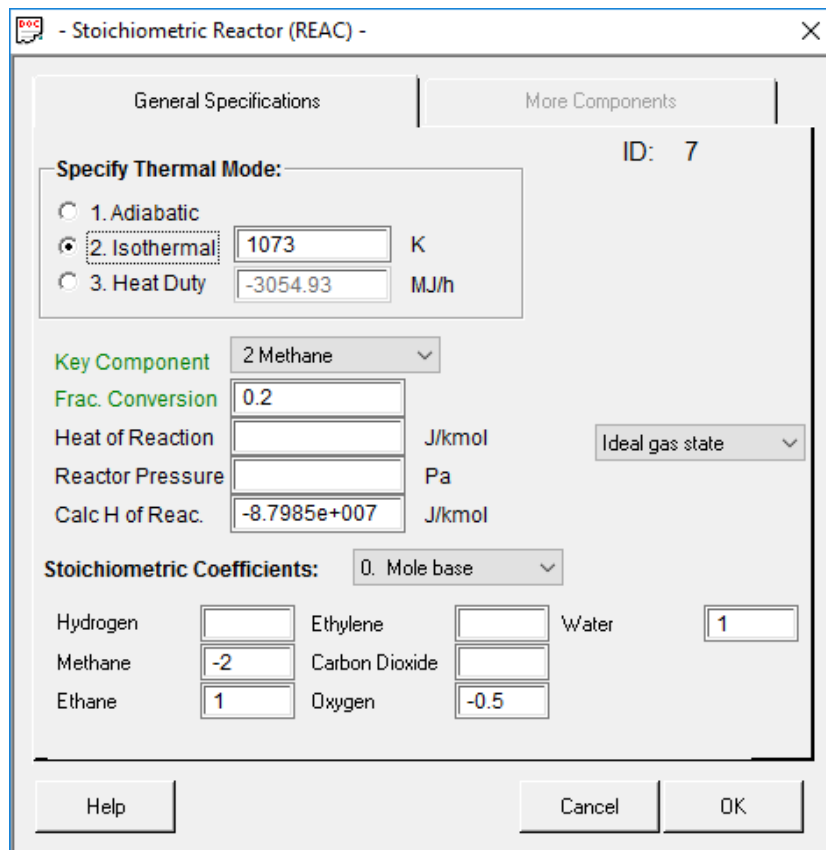


Рис. В.28. Налаштування параметрів реактора

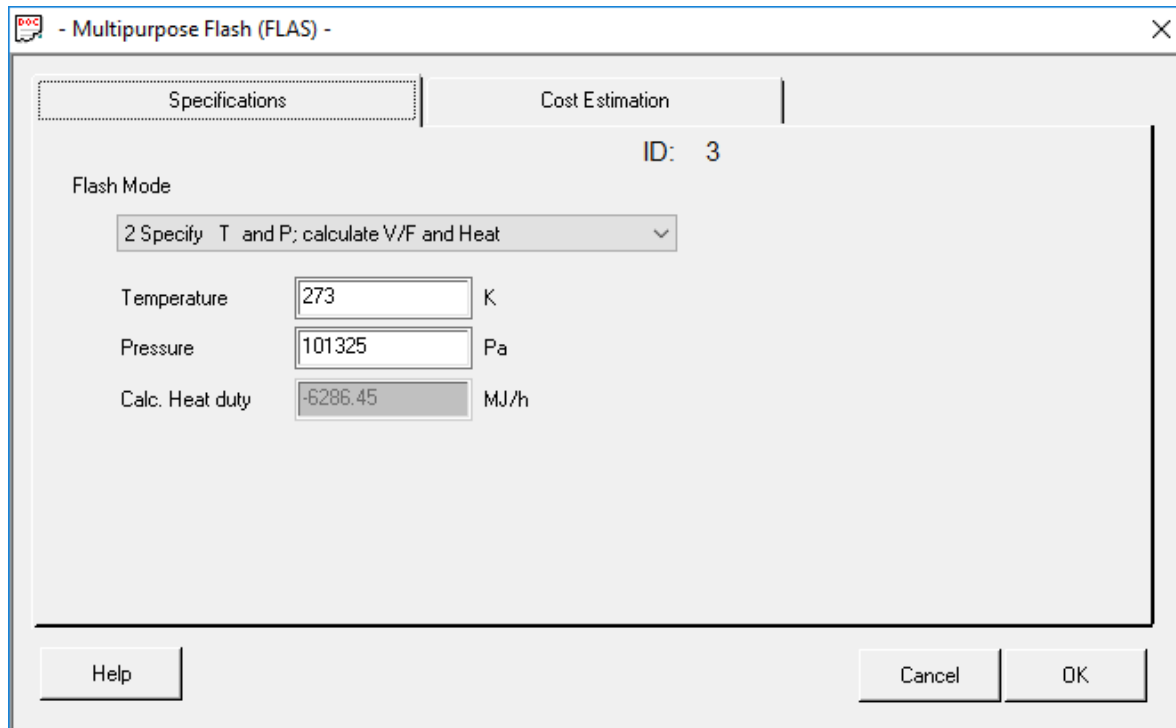


Рис. В.29. Налаштування параметрів випарника

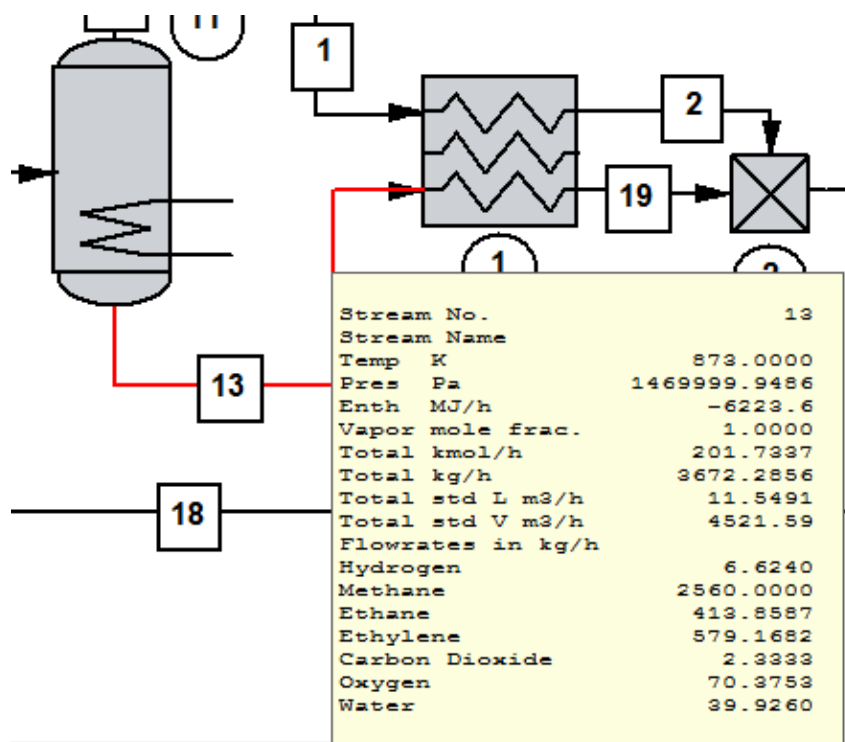


Рис. В.30. Інформація про рецикл (потік №13)

Таблиця В.12

Звіт з термодинаміки

CHEMCAD 6.3.1		Page 1	
Simulation: Course_work_Shagan		Date: 12/18/2016 Time: 20:34:58	
COMPONENTS			
	ID #	Name	Formula
1	1	Hydrogen	H2
2	2	Methane	CH4
3	3	Ethane	C2H6
4	22	Ethylene	C2H4
5	49	Carbon Dioxide	CO2
6	47	Oxygen	O2
7	62	Water	H2O
THERMODYNAMICS			
K-value model : Raoult's Law (Ideal Vapor Pressure)			
Enthalpy model : SRK			
Liquid density : Library			
Std vapor rate reference temperature is 0 C.			
Atmospheric pressure is 101324.9793 Pa.			

Інформація про потоки схеми

CHEMCAD 6.3.1		Page 1			
Simulation: Course_work_Shagan		Date: 12/18/2016 Time: 20:44:34			
FLOW SUMMARIES:					
Stream No.	1	2	3	4	
Stream Name	Natural gas				
Temp K	113.0000*	273.0000	770.0600	273.0000	
Pres Pa	101325.0000*	101325.0000	101325.0000	101325.0000	
Enth MJ/h	-3586.1	-3276.2	-9789.9	-16076.	
Vapor mole frac.	0.91077	1.0000	1.0000	0.99718	
Total kmol/h	49.9978	49.9978	252.7890	252.7890	
Total kg/h	700.0001	700.0001	4406.1250	4406.1250	
Total std L m3/h	2.4748	2.4748	14.0539	14.0539	
Total std V m3/h	1120.63	1120.63	5665.92	5665.92	
Flowrates in kg/h					
Hydrogen	18.0000	18.0000	24.6240	24.6240	
Methane	640.0000	640.0000	3200.0005	3200.0005	
Ethane	21.0000	21.0000	434.8588	434.8588	
Ethylene	0.0000	0.0000	579.1684	579.1685	
Carbon Dioxide	21.0000	21.0000	23.3333	23.3333	
Oxygen	0.0000	0.0000	104.2136	104.2136	
Water	0.0000	0.0000	39.9260	39.9259	
Stream No.	5	6	7	8	
Stream Name	Oxygen				
Temp K	273.0000	1073.0000	25.0000*	1046.8047	
Pres Pa	101325.0000	101325.0000	101325.0000*	101325.0000	
Enth MJ/h	-15910.	-6474.9	-165.77	-6640.7	
Vapor mole frac.	0.99579	1.0000	0.00000	1.0000	
Total kmol/h	217.6827	217.6827	10.0003	227.6830	
Total kg/h	3392.0973	3392.0973	320.0000	3712.0974	
Total std L m3/h	11.1790	11.1790	0.2838	11.4628	
Total std V m3/h	4879.06	4879.06	224.14	5103.21	

Топологія технологічної схеми

CHEMCAD 6.3.1		Page 1						
Simulation: Course_work_Shagan		Date: 12/18/2016 Time: 20:52:24						
FLOWSHEET SUMMARY								
Equipment	Label	Stream Numbers						
1	LNGH	13	1 -19 -2					
2	MIXE	19	2 -3					
3	FLAS	3	-4					
4	CSEP	4	-5 -16					
5	HTXR	5	-6					
6	MIXE	6	7 -8					
7	REAC	8	-9					
8	MIXE	9	18 -10					
9	REAC	10	-11					
10	HTXR	11	-12					
11	CSEP	12	-15 -13					
12	CSEP	16	-20 -17					
13	HTXR	17	-18					
Stream Connections								
Stream	Equipment		Stream	Equipment		Stream	Equipment	
	From	To		From	To		From	To
1		1	8	6	7	16	4	12
2	1	2	9	7	8	17	12	13
3	2	3	10	8	9	18	13	8
4	3	4	11	9	10	19	1	2
5	4	5	12	10	11	20	12	
6	5	6	13	11	1			
7		6	15	11				

Інформація про контур з рециклом

CHEMCAD 6.3.1	Page 1
Simulation: Course_work_Shagan	Date: 12/18/2016 Time: 20:55:49
Calculation mode : Sequential Flash algorithm : Normal	
Equipment Calculation Sequence	
1	2 3 4 5 6 7 12 13 8 9 10 11
Equipment Recycle Sequence	
1	2 3 4 5 6 7 12 13 8 9 10 11
Recycle Cut Streams	
13	
Recycle Convergence Method: Direct Substitution	
Max. loop iterations	40
Recycle calculation has converged.	

Звіт з матеріального та енергетичного балансу

CHEMCAD 6.3.1		Page 2		
Simulation: Course_work_Shagan		Date: 12/18/2016 Time: 20:55:49		
Overall Mass Balance	kmol/h		kg/h	
	Input	Output	Input	Output
Hydrogen	8.929	29.574	18.000	59.616
Methane	39.893	0.000	640.000	0.000
Ethane	0.698	0.000	21.000	0.000
Ethylene	0.000	20.645	0.000	579.168
Carbon Dioxide	0.477	0.477	21.000	21.000
Oxygen	10.000	0.000	320.000	0.000
Water	0.000	19.946	0.000	359.334
Total	59.998	70.643	1020.000	1019.118
Overall Energy Balance	MJ/h			
	Input	Output		
Feed Streams	-3751.86			
Product Streams		-3032.76		
Total Heating	10168.7			
Total Cooling	-9449.14			
Power Added	0			
Power Generated	0			
Total	-3032.26	-3032.76		

Зведемо до табл. В.17 вхідні та вихідні потоки та перевіримо матеріальний баланс розглянутої схеми.

Як видно з таблиці, матеріальний баланс сходиться, похибка становить 0,1%. Тому запропонована схема процесу окислювальної конденсації метану є придатною для використання. Знов таки, цей варіант схеми в загальній стратегії (розділ 4.6) можна розглядати як базовий, із подальшим оцінюванням властивостей запропонованої схеми.

Матеріальний баланс схеми

Компоненти	кмоль/год		кг/год	
	Вхід	Вихід	Вхід	Вихід
Водень	8,929	29,574	18,0	59,6
Метан	39,893	0,000	640,0	0,0
Етан	0,698	0,000	21,0	0,0
Етилен	0,000	20,645	0,0	579,2
Вуглекислий газ	0,477	0,477	21,0	21,0
Кисень	10,000	0,000	320,0	0,0
Вода	0,000	19,946	0,0	359,3
Сума	59,998	70,643	1020,0	1019,1

В прикладі показано, що крім інформації, представленої вище, в програмі Chemcad можна отримати значення екологічних впливів для даного варіанту схеми за алгоритмом *WAR* (розділ 5.5).

Для цього після розрахунку схеми достатньо перейти до пункту меню:

Tools ->Environmental Report

як показано на рис. В.30.

Вікно набуває вигляду, який ми бачимо на рис. В.31.

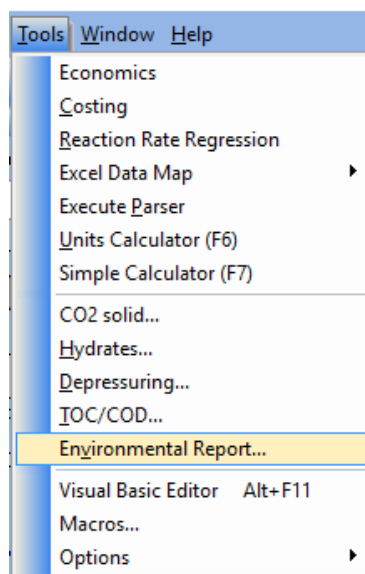


Рис. В.30. Меню для дослідження екологічних впливів за алгоритмом *WAR*

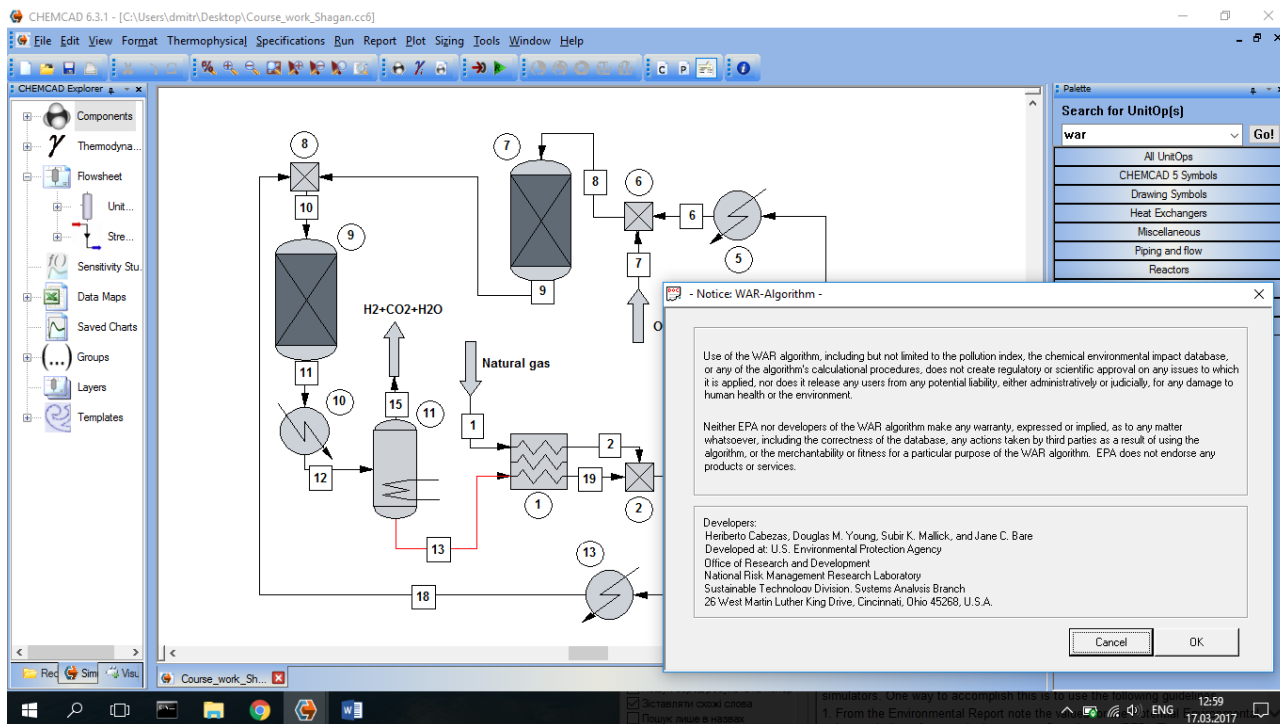


Рис. В.31. Підключення алгоритму WAR для оцінювання екологічних впливів схеми

Наступні кроки пов'язані із налаштуванням процесу оцінювання. Треба обрати потоки та ваги для різних рівней впливів (враховано 8 рівней), як можна бачити на рис. В.32. Після проведення оцінювання значення впливів можна побачити у відповідному звіті, який наведено у вікні на рис. В.33.

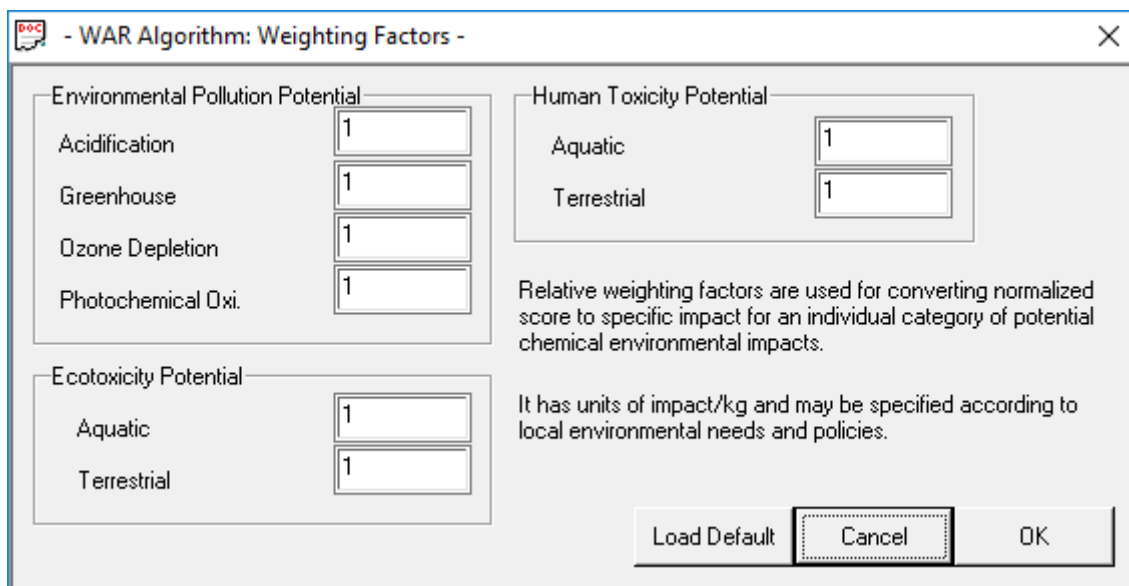


Рис. В.32. Визначення ваг для рівней впливів алгоритму WAR

Normalized Impact Scores

ID Component Name	Ozone Depletion	Global Warming	Smog Formation	Acid Rain
1 Hydrogen	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000
2 Methane	0.00e+000	3.49e-003	1.44e-002	0.00e+000
3 Ethane	0.00e+000	0.00e+000	1.69e-001	0.00e+000
22 Ethylene	0.00e+000	0.00e+000	2.05e+000	0.00e+000
49 Carbon Dioxide	0.00e+000	3.17e-004	0.00e+000	0.00e+000
47 Oxygen	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000
62 Water	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000

Normalized Impact Scores

ID Component Name	<- Human Toxicity -->		<--- EcoToxicity --->	
	OSHA PEL	LD50	LC50	LD50
1 Hydrogen	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000
2 Methane	0.00e+000	0.00e+000	5.59e-002	0.00e+000
3 Ethane	0.00e+000	0.00e+000	2.26e-002	0.00e+000
22 Ethylene	0.00e+000	0.00e+000	3.69e-002	0.00e+000
49 Carbon Dioxide	3.24e-005	0.00e+000	9.03e-002	0.00e+000
47 Oxygen	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000
62 Water	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000	0.00e+000

Relative Weighting Factor

Impact Category	Value (imp/kg)
Ozone Depletion Potential	1.00e+000
Global Warming Potential	1.00e+000
Photochemical Oxidation Potential	1.00e+000
Acidification Potential	1.00e+000
Human Toxicity Potential by Exposure	1.00e+000
Human Toxicity Potential by Ingestion	1.00e+000
Aquatic Toxicity Potential	1.00e+000
Terrestrial Toxicity Potential	1.00e+000

Рис. В.33. Визначення потенційних екологічних впливів за алгоритмом WAR

Значення впливів набуває значущості при порівнянні декількох варіантів технологічної схеми процесу. Зрозуміло, що чим менше ці впливи, тим більша еко-ефективність технологічної схеми. Тому дослідження процесу може бути продовжено в напрямку пошуку варіанта схеми, який більше відповідає вимогам еко-ефективності і тим самим може розглядатися у термінах сталого виробництва.

Додаток Г

Оцінювання сталого розвитку хіміко-технологічних процесів на основі теорії потенційного екологічного впливу

Г.1. Теорія потенційного екологічного впливу та можливість її використання для оцінювання сталого розвитку хімічних виробництв

Потенційний вплив на навколишнє середовище - це можливий середній ефект чи вплив від викидів речовин і енергії на навколишнє середовище. Тобто потенційний вплив на навколишнє середовище процесів хімічного виробництва, як правило, викликаний енергією і речовинами, що використовуються в самому процесі або викидаються в навколишнє середовище. Потенційний вплив на навколишнє середовище вводиться як безрозмірна величина, що не може бути безпосередньо виміряна. Тим не менш, потенційний вплив на навколишнє середовище можна обчислити за допомогою пов'язаних вимірюваних величин і з використанням функціональних залежностей між ними. Так само наприклад, як енергія рідини не може бути визначена, але вона може бути обчислена по температурі і тиску за рахунок використання теплоємності і рівнянь стану.

Потенційний екологічний вплив з урахуванням енергетичного балансу можна відобразити схемою (рис. Г.1) та рівнянням Г.1:

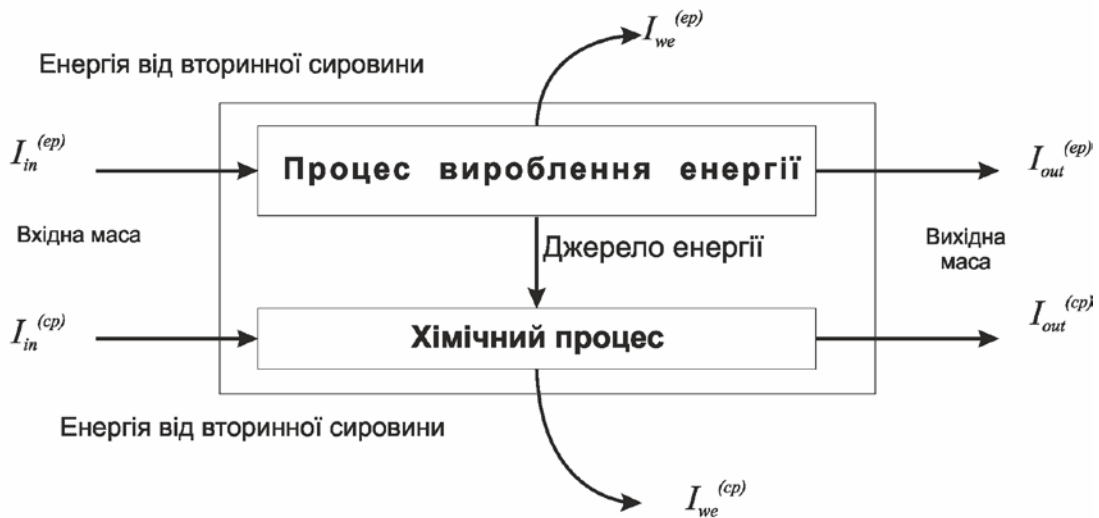


Рис. Г.1. Врахування енергії при розрахунку потенційного екологічного впливу

$$\frac{dI_t}{dt} = I_{in}^{(cp)} + I_{in}^{(ep)} - I_{out}^{(cp)} - I_{out}^{(ep)} - I_{we}^{(cp)} - I_{we}^{(ep)} + I_{gen}^{(t)} \quad (Г.1)$$

де I_t – кількість потенційного впливу на навколишнє середовище в системі (хімічний процес + процес утворення енергії), $I_{in}^{(cp)}$ та $I_{out}^{(cp)}$ – вхідні та вихідні потоки впливу на навколишнє середовище в/із хімічного процесу, $I_{in}^{(ep)}$ та $I_{out}^{(ep)}$ – вхідні та вихідні потоки впливу на навколишнє середовище в/із процесу утворення енергії, $I_{we}^{(cp)}$ та $I_{we}^{(ep)}$ – вихід потенціального впливу на навколишнє середовище, пов'язаний з енергією від вторинної сировини (позначається індексом we), яка втрачається під час протікання

хімічного процесу та процесу утворення енергії; і $I_{gen}^{(t)}$ – ступінь утворення потенціального впливу на навколишнє середовище в системі. $I_{gen}^{(t)}$ – визначає створення та поглинання потенціального впливу на навколишнє середовище в середині хімічного процесу та всього заводу в цілому.

Рівняння збереження впливу

Традиційно, процес моделювання хімічного процесу заснований на застосуванні масових і енергетичних балансів. Розглядувана методологія пропонує додати до вищезазначених двох рівнянь рівноваги, залежність збереження на ряду з потенційним впливом на навколишнє середовище. Рівняння збереження впливу базується на обліку потоку потенційних впливів на навколишнє середовище, які входять в хімічний процес та утворюються внаслідок його протікання. Цей впливовий потік пов'язаний з потоками маси і енергії, але не прирівнюється до них. Рівняння збереження впливу:

$$\frac{dI_{syst}}{dt} = I_{in} - I_{out} + I_{gen} \quad (\Gamma.2)$$

де I_{syst} виражає потенційний екологічний вплив в самому процесі, I_{in} показує ступінь потенційного впливу на вході, I_{out} показує ступінь потенційного впливу на виході, а також I_{gen} виражає потенційний вплив, утворений в системі, в результаті хімічних реакцій.

Варто звернути увагу, що процеси можуть також поглинати речовини, які створюють негативний вплив на навколишнє середовище, а отже і I_{gen} може, по суті, бути від'ємним. Для стаціонарних процесів, рівняння збереження зводиться до:

$$0 = I_{in} - I_{out} + I_{gen} \quad (\Gamma.3)$$

звідки випливає, що в системі не накопичується ніякого потенціального впливу на навколишнє середовище. Також варто зазначити, що рівняння (Г.2) і (Г.3) служать для визначення I_{gen} .

Значення потенційного впливу на навколишнє середовище можна краще зрозуміти, якщо розглянути наступні визначення. Якби всі масові та енергетичні потоки, що входять в процес викидалися в навколишнє середовище, то результуючий вплив на навколишнє середовище дорівнював би I_{in} . В випадку, коли всі вихідні масові та енергетичні потоки процесу викидалися б в навколишнє середовище, то результуючий вплив на навколишнє середовище дорівнював би I_{out} .

Однак, через хімічні перетворення і зміни в процесі (температура і тиск), I_{in} ніколи не дорівнює I_{out} , а, отже і I_{gen} ніколи не дорівнює нулю для стаціонарних процесів.

Індекси екологічного впливу, як показники сталого розвитку хімічного виробництва

Застосування формул (Г.2) або (Г.3) для хімічних процесів, вимагає залежності, яка б зв'язувала потенційний вплив на навколишнє середовище з вимірюваними величинами. Потенційні екологічні наслідки, викликані енергетичними і матеріальними потоками, що входять в систему або виходять з неї в навколишнє середовище. Але, на перший погляд, цей підхід обмежений потенційним впливом, обумовленим матеріальними потоками, який не враховує впливи, пов'язані з енергією. Ефектами,

обумовленими виснаженням ресурсів також нехтують, головним чином, через відсутність дієвої методики для їх вимірювання. Вираз, що зв'язує хімічний потенціал впливу на навколишнє середовище з вимірюваною величиною представлений формулою (Г.4):

$$I_t = \sum_j I_j^{(i)} = \sum_j M_j^{(i)} \sum_k x_{kj} \psi_j + \dots \quad (\text{Г.4})$$

де сума по j береться із вхідного або вихідного потоку i , сума по k береться з урахуванням всіх хімічних елементів реакції, I_i – швидкість потенційного впливу на навколишнє середовище для потоку j , який може бути вхідним або готовим продуктом, $M_j^{(i)}$ масова витрата потоку j , який може бути як вхідним, так і вихідним, x_{kj} – масова частка хімічного елементу k в потоці j , і ψ_j є загальний потенціал впливу на навколишнє середовище хімічних речовин j . Зауважимо, що рівняння (Г.4) – це першочергове рівняння апроксимації, яке не включає спільних ефектів, які можуть виникнути, коли присутні кілька хімічних речовин.

Для того, щоб визначити дві категорії індексів для екологічного впливу стаціонарного стану процесів хімічного виробництва, можна використовувати рівняння (Г.1). Перша категорія індексів вимірює утворення потенційного впливу на оточуюче середовище в межах процесів, а друга – потенційний вплив на оточуюче середовище, викликаний самими процесами. Науковцями розроблено багато різних індексів в межах кожної категорії. Розглянемо лише шість індексів, по три з кожної категорії, що є найбільш придатними та корисними для вирішення проблеми зменшення відходів.

Усі відходи розглядаються як забруднювачі, тому, потенційний вплив усіх продуктів на навколишнє середовище зводиться до 0, тобто $\psi_j=0$ для усіх продуктів j . Ці припущення сумісні з метою зменшення відходів, тобто першочергово це стосується зменшення негативного впливу та кількості «не-продуктів». Перший індекс першої категорії індексів, отриманий з рівняння (Г.3) для I_{gen}^{NP} та додавання надрядкового індексу NP для «не-продуктів» дає вираз (Г.5):

$$I_{gen}^{NP} = I_{out}^{NP} - I_{in}^{NP} \quad (\text{Г.5})$$

де I_{out}^{NP} та I_{in}^{NP} – потенційні впливи на навколишнє середовище, що відносяться до не-продуктів, тобто забруднювачів на виході та на вході. Відповідно до рівняння (Г.3) можна дати точне формулювання для I_{out}^{NP} та I_{in}^{NP} , де усі компоненти, продукти та не-продукти, включені в суму, але оскільки для усіх продуктів $\psi_j=0$, то із сумування продукти видаляються. Індекс I_{gen}^{NP} , вимірює загальну швидкість, з якою процес здійснює потенційний вплив на навколишнє середовище через не-продукти (*non-products-NP*). Для I_{gen}^{NP} в якості одиниць вимірювання використовується потенційний вплив на навколишнє середовище, що створюється з часом.

Другий індекс \widehat{I}_{gen}^{NP} з першої категорії отриманий діленням рівняння (Г.5) на швидкість при якій процес виробляє продукти, дає питомий вплив (Г.6):

$$\widehat{I}_{gen}^{NP} = \frac{I_{gen}^{NP}}{\sum_p P_p} = \frac{I_{out}^{NP} - I_{in}^{NP}}{\sum_p P_p} \quad (\text{Г.6})$$

де суми по p взяті за всіма продуктами p , і P_p – масова витрата продукту p . \widehat{I}_{gen}^{NP} визначає потенційний вплив, який створюється всіма відходами виробництва масової одиниці продуктів p . Індекс \widehat{I}_{gen}^{NP} має розмірність: потенційний вплив на навколишнє середовище на одиницю маси продукту. Третій індекс першої категорії, \widehat{M}_{gen}^{NP} виходить

з рівняння (Г.6), шляхом прирівнювання потенційного впливу на навколишнє середовище (ψ_j) усіх продуктів, до нуля, і відповідних їм відходів до одиниці. Це має ефект присвоєння того ж потенціалу впливу на навколишнє середовище для всіх відходів. Індекс \widehat{M}_{gen}^{NP} є мірою масової неефективності процесу, тобто він показує відношення переробленої сировини в небажану форму до переробленої сировини в бажану форму. Рівняння для \widehat{M}_{gen}^{NP} має вигляд (Г.7):

$$\widehat{M}_{gen}^{NP} = \frac{\sum_j M_j^{(out)} \sum_k x_{kj}^{NP} - \sum_j M_j^{(in)} \sum_k x_{kj}^{NP}}{\sum_p P_p} \quad (\text{Г.7})$$

де сума по $M_j^{(out)}$ береться тільки по вихідним потокам, сума по $M_j^{(in)}$ береться тільки по вхідним потокам, а сума по x_{kj}^{NP} береться тільки по всім відходам k в потоці j . Одиницею вимірювання \widehat{M}_{gen}^{NP} є маса відходів до маси продуктів.

Перший індекс другої категорії показників (вплив викидів) I_{out}^{NP} є просто загальним коефіцієнтом потенційного екологічного впливу вихідних речовин. I_{out}^{NP} розраховується за формулою (Г.4) за умови що $\psi_j=0$ для всіх продуктів j . Індекс, I_{out}^{NP} є мірою швидкості, з якою процес виділяє потенційний вплив на навколишнє середовище; одиницею вимірювання є одиниця потенціального впливу за одиницю часу.

Другий індекс другої категорії \widehat{I}_{out}^{NP} (Г.8) обчислюється шляхом розділення швидкості потенційного екологічного впливу від відходів та швидкості отримання продукту:

$$\widehat{I}_{out}^{NP} = \frac{t_{out}^{NP}}{\sum_p P_p} \quad (\text{Г.8})$$

Індекс \widehat{I}_{out}^{NP} має розмірність: одиниця потенційного впливу на навколишнє середовище до маси продукту. Цей вираз дає індекс забруднення, який вимірює потенціал впливу на навколишнє середовище, що випускається при виробництві одиниці маси продуктів.

Третій індекс другої категорії виходить з рівняння (Г.8), шляхом встановлення потенційного впливу на навко \widehat{M}_{out}^{NP} лишнє середовище (ψ_j) всієї продукції до нуля і всіх відходів до одиниці (Г.9). Отримуємо наступний вираз:

$$\widehat{M}_{out}^{NP} = \frac{\sum_j M_j^{(out)} \sum_k x_{kj}^{NP}}{\sum_p P_p} \quad (\text{Г.9})$$

який пов'язаний з індексом забруднення ϕ_n наступним чином:

$$\widehat{M}_{out}^{NP} = \sum_n \phi_n \quad (\text{Г.10})$$

де сума обчислюється з урахуванням всієї продукції n . \widehat{M}_{out}^{NP} вимірює кількість не пов'язаних з масою продукції або забруднюючої речовини, що випускаються при виробництві одиниці маси продукту, і має наступну одиницю вимірювання: маса відходів на масу продукту. Крім того, він також являється показником масової неефективності.

Вагомість індексів впливу

Перша категорія індексів, тобто I_{gen}^{NP} , \widehat{I}_{gen}^{NP} і \widehat{M}_{gen}^{NP} характеризують деякі аспекти утворення потенційного впливу на навколишнє середовище в процесі виробництва. Вони є найбільш корисними у вирішенні питань, пов'язаних з внутрішньою екологічною ефективністю технологічних установок, тобто здатністю заводу у випуску цільових продуктів при створенні мінімального небажаного потенційного впливу на навколишнє середовище. Важливо відзначити, що, як тільки виникає новий потенційний вплив на навколишнє середовище, ймовірно, буде необхідним залучення потенційно дорогих ресурсів для запобігання утворенню шкідливих речовин. Очевидно, що чим менше значення I_{gen}^{NP} , \widehat{I}_{gen}^{NP} і \widehat{M}_{gen}^{NP} , тим більш екологічно ефективним є процес і всі інші фактори, які від нього залежать. Індекс I_{gen}^{NP} буде корисним при порівнянні різних конструкцій на одній основі, в той же час \widehat{I}_{gen}^{NP} і \widehat{M}_{gen}^{NP} будуть корисні при порівнянні різних конструкцій незалежно від розмірів виробництва.

Друга категорія індексів, тобто I_{out}^{NP} , \widehat{I}_{out}^{NP} і \widehat{M}_{out}^{NP} характеризують деякі аспекти викидів потенційного впливу на навколишнє середовище від виробничого процесу. Їх головна роль – це використання при вирішенні питань, пов'язаних із зовнішньою екологічною ефективністю технологічних установок, тобто здатністю заводу з випуску цільових продуктів при мінімальній шкоді на навколишнє середовище мінімум. Очевидно, що чим менші значення I_{out}^{NP} , \widehat{I}_{out}^{NP} і \widehat{M}_{out}^{NP} , тим більш екологічним є процес, і всі інші фактори. I_{out}^{NP} є загальною швидкістю викидів, також він може бути корисним при вирішенні питання, чи є доречним будівництво заводу на певній території. Наприклад, було б нерозумно, щоб завод з високим I_{out}^{NP} будувався в екологічно чутливій зоні. Індекс I_{out}^{NP} також може бути використаний у встановленні відповідності потужності та розміру заводу до навколишнього середовища, щоб розсіяти вплив на навколишнє середовище \widehat{I}_{out}^{NP} і \widehat{M}_{out}^{NP} більш корисні при порівнянні потенційного екологічного впливу альтернативних процеси, незалежно від розміру заводу.

Хімічний вплив на навколишнє середовище

Застосування методології, яка досі розвивається, вимагає, щоб можна було оцінити потенційний вплив хімічних речовин на навколишнє середовище. Крім того, потрібно, щоб для кожної хімічної складової j було знайдено число відносного впливу ψ_j із широкого діапазону різних хімічних впливів на навколишнє середовище. Це, на жаль, не тривіальне питання, бо хімічний вплив вимірюється в різних відносних величинах, які не можуть бути просто додані без будь-якої нормалізації.

Для застосування методології WAR до хімічного процесу, для обчислення ψ_j (відносного впливу) використовується вираз (Г.11):

$$\psi_j = \sum_l \alpha_l \psi_{jl}^s \quad (\text{Г.11})$$

Сума береться по категоріям потенційних хімічних впливів на навколишнє середовище, наприклад, потенціал руйнування озону, здоров'я людини і т.д.

Де α_l є відносним ваговим коефіцієнтом для впливу типу l , незалежного від хімічних речовин j , а ψ_{jl}^s є конкретним потенційним впливом на навколишнє середовище хімічних речовин j для впливу типу l . Розмірність α_l – одиниця потенційного впливу на навколишнє середовище на одиницю масу.

Відносний ваговий коефіцієнт α_l дозволяє підлаштувати вираз (Г.11) під специфічні або локальні умови. Можна спочатку встановити всі α_l як єдине значення, скажімо, одиниця, і дозволити користувачам змінювати окремі α_l від 0 до 10 відповідно до місцевих потреб і локальної політики. Необхідно звернути увагу, що для відносного порівняння, абсолютна величина не є важливою. Наприклад, фотохімічний потенціал окислення буде мати більшу вагу, ніж інші індекси в області, яка потерпає від смогу. Існує можливість розробити більш досконалі методи визначення α_l .

Значення для ψ_{ij}^s були отримані з відносних нормалізованих показників (Г.12) або показників для хімічних речовин:

$$\psi_{ij}^s = \frac{(Score)_{ij}}{\langle (Score)_i \rangle_j + 2\sigma_j} \quad (Г.12)$$

де $(Score)_{ij}$ є відносна оцінка хімічної речовини i на деякому довільному масштабі в межах впливу категорії j , $\langle (Score)_i \rangle_j$ є середньою арифметичною оцінкою всіх хімічних речовин i , в межах впливу категорії j , і σ_j є стандартним відхиленням всіх хімічних оцінок в категорії впливу j . Фактор нормалізації $\langle (Score)_i \rangle_j + 2\sigma_j$ забезпечує той факт, що близько 75% від нормалізованих чисел оцінки хімічного впливу будуть лежати від 0 до 1, незалежно від статистичного розподілу початкової оцінки, як очікувалося з теореми Чебишева. Якщо оцінки хімічних елементів почнуть відповідати нормальному розподілу, то діапазон нормалізації збільшиться до 95%.

Класифікація впливів, прийнята EPA

Класифікація хімічних впливів на навколишнє середовище і значення $(Score)_{ij}$ були прийняті на підставі праць американських вчених відповідно до формули (Г.11) для отримання ψ_{ij}^s . В розрахунках $\langle (Score)_i \rangle_j$ і σ_j була виключена хімічна оцінка діоксину, хрому VI і вінілхлориду. Причина в тому, що оціночні числа для цих трьох хімічних речовин були на кілька порядків вище ніж у всіх інших хімічних речовин, тому їх включення в процес нормалізації зробив би нормалізацію неможливою. Таким чином, нормоване ψ_{ij}^s для цих трьох хімічних речовин буде виглядати як викиди, чим вони, по суті, і є.

Щоб мати уявлення про потенційний екологічний наслідок від хімічних процесів, була створена база даних відносно екологічної оцінки впливу для хімічних речовин. Дані спираються на державні та комерційні джерела.

Розрізняють вісім різних категорій впливу. Вони можуть бути поділені на чотири екологічно-фізичні потенціальні:

- Потенціал токсичності на людину при прийомі всередину (HTPI);
- Потенціал токсичності на людину при вдиханні або попаданні на шкіру (HTPE);
- Потенціал руйнування озонового шару (ODP);
- Потенціал глобального потепління (GWP);
- Потенціал фотохімічного окислення (PCOP);
- Потенціал окислення (AP);
- Потенціал водної токсичності (ATP);
- Потенціал земної токсичності (TTP).

Г.2. Комп'ютерні засоби для оцінювання сталості ХТС

Програмні засоби, що можна застосувати для оцінки сталості ХТС, розділяються на дві групи: вільне та комерційне. До вільного відносяться за стандартом CAPE-OPEN:

- *COFE*;
- *WAR GUI*;
- *Advanced Process Analysis System*.

Потужні комерційні програмні засоби:

- *HYSYS + gPROMS + ENVOPExpert*;
- *CHEMCAD + WAR Module*.

Всі ці програмні пакети для оцінки екологічного впливу використовують алгоритм *WAR*.

Програмний пакет *COFE*

COFE представляє собою програму-симулятор хіміко-технологічних процесів. В програмі реалізована можливість побудови технологічних схем із заданням параметрів апаратів та складів потоків, а також, всіх параметрів протікання процесу (тиск, температура і т.п.).

Модуль для оцінки екологічного впливу підключається окремо і працює за стандартом *CAPE-OPEN*. Алгоритмом для розрахунку показників сталості є *WAR* алгоритм, який включений в програму як додаток для детального дослідження технологічної схеми. Необхідно лише підключити модуль і він готовий до роботи (Рис. Г.2).

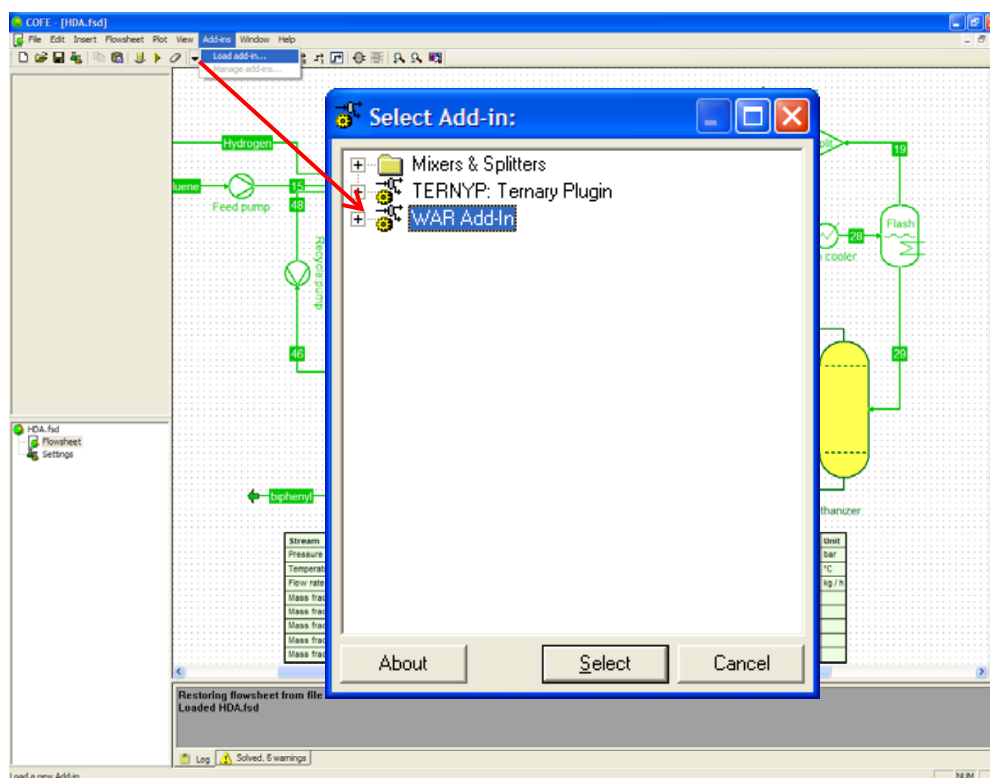


Рис. Г.2. Підключення додатку *WAR* в програмному середовищі *COFE*

Після підключення модуль *WAR* може отримувати дані з усіх потоків в схемі.

З діалогового вікна (Рис. Г.3) модуля *WAR*, видно, що програма вже визначила зв'язність схеми. Цей зв'язок залежить від того, яку частину технологічної схеми ми хочемо розглянути. У цьому прикладі ми розглядаємо технологічну схему в цілому, тому в лівій частині вікна вибираємо всі наявні об'єкти. В середній частині необхідно обрати потоки, а праворуч, - потоки, які виходять із схеми. Деякі з них є відходами, а деякі – продуктами. Нашою задачею є відділення продуктів. Потенційний вплив на навколишнє середовище також пов'язаний з енергією. Але це залежить від джерела енергії, який ми використовуємо. Вибір потенційних екологічних параметрів впливу доступний для декількох видів енергії. Виберемо один із них.

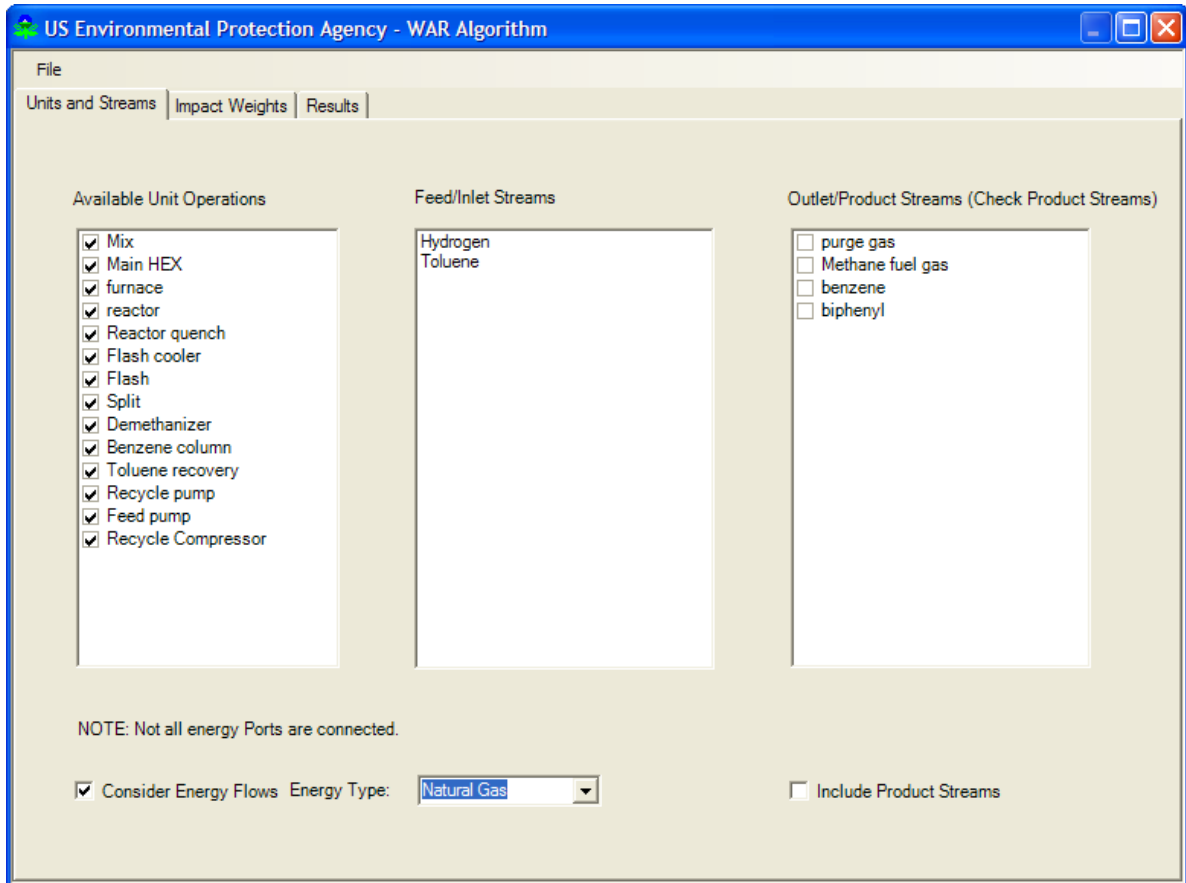


Рис. Г.3. Діалогове вікно модуля *WAR* в програмному середовищі *COFE*

Потім потрібно перейти на сторінку результатів роботи *WAR* алгоритму. Звіт показує загальну кількість потенційного впливу на навколишнє середовище в процесі і відношення до кожної екологічної категорії. Можна зберегти або роздрукувати результати для подальшої обробки (рис. Г.4).

Units and Streams Impact Weights Results						
Iout PEI/hour	Iout PEI/kg	Igen PEI/hour	Igen PEI/kg	Ie		
6.328E+003	N/A	-1.574E+004	N/A	0.		
Individual impact categories						
Total output rate of PEI (PEI/hour)						
HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
1.48E+003	1.94E+002	1.48E+003	2.70E+002	1.65E+001	0.00E+000	2.
Total PEI leaving the system per mass of products (PEI/kg product)						
HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/
Total generation rate of PEI (PEI/hour)						
HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
6.25E+002	1.89E+002	3.25E+002	9.63E+001	1.50E+001	0.00E+000	-1
Total PEI generated within a system per mass of products (PEI/kg product)						
HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/
Output rate of PEI from energy usage (PEI/hour)						
HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
0.00E+000	0.00E+000	0.00E+000	0.00E+000	0.00E+000	0.00E+000	0.

Рис. Г.4. Результати роботи WAR алгоритму

Програма WAR GUI

Програма розроблена *US EPA* (Міністерство охорони навколишнього середовища США) для проведення розрахунків, з метою зменшення кількості відходів в хімічному виробництві (рис. Г.5). Розрахунки базуються на алгоритмі *WAR*.

Ця програма дозволяє користувачеві порівнювати потенційний вплив на навколишнє середовище (*PEI*) кількох різних схем процесу одночасно. Користувач може зберігати дані для декількох схем процесу у файлі. Інформація для кожної схеми процесу зберігається в окремому файлі, який містить всю інформацію, необхідну для оцінки процесу з використанням *WAR* алгоритму:

- 1) Список всіх хімічних речовин, що входять або виходять з процесу.
- 2) Дані про всі потоків в процесі:
 - Масова витрата кожного потоку;
 - Склад кожного потоку (наприклад, масова частка кожного хімічної речовини, в кожному потоці);
 - Тип кожного потоку (тобто чи є вони вхідними, вихідними потоками, або продуктом).
- 3) Споживання енергії процесом.

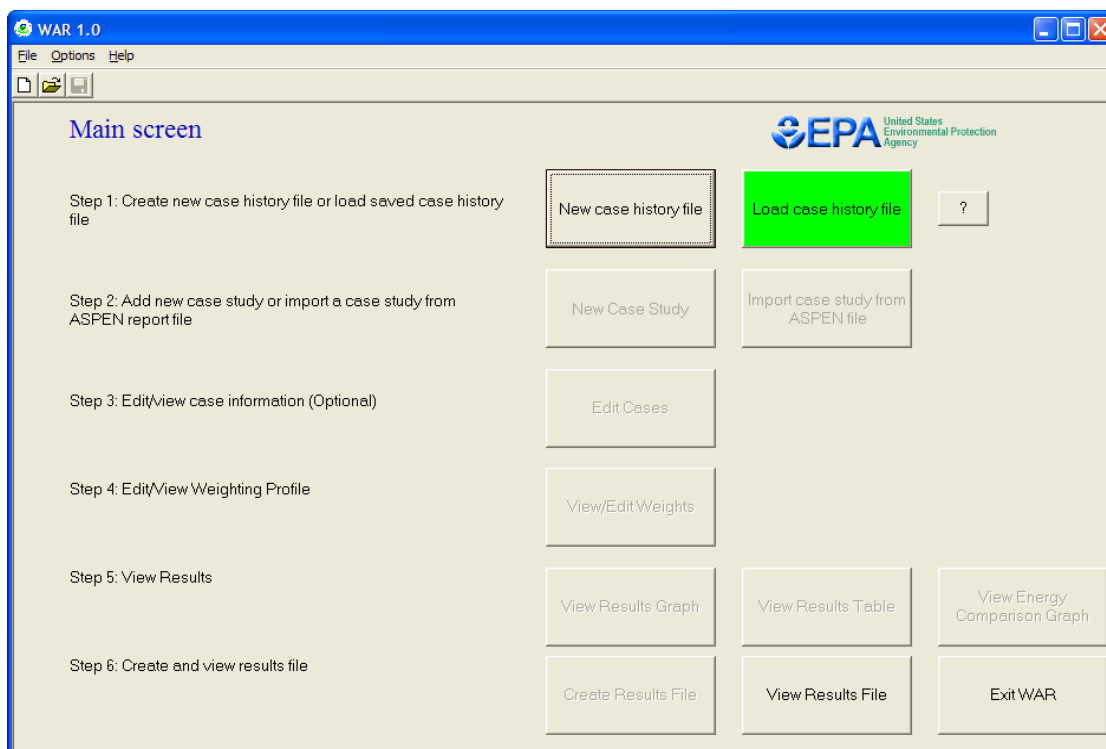


Рис. Г.5. Головне вікно WAR GUI

WAR GUI містить базу даних екологічного впливу приблизно 1700 хімічних речовин. База даних зберігається у двох файлах – перший користувач може змінити (користувальницькі бази даних) і другий – база даних за замовчуванням. Після установки ці файли ідентичні. База даних користувача дозволяє користувачу додавати хімічні речовини або змінювати дані для існуючих хімічних речовин. Всі розрахунки проводяться з використанням поточних значень в користувацькій базі даних. Крім того, за необхідністю, значення впливу для окремих хімічних речовин, може бути відновлено до значень в базі даних за замовчуванням.

Програма Advanced Process Analysis System

Функціональні можливості цієї програми доволі широкі. Вона дозволяє не тільки оцінювати вплив хімічного процесу на навколишнє середовище, але й виконує звичайні функції симулятора процесів (рис. Г.6). Також, основною відмінністю від попередніх програм, є те, що *Advanced Process Analysis System* має ще модуль, який дозволяє проводити оптимізацію обраної схеми. Як тільки модель розроблена з використанням модуля *Flowsim*, наступним кроком є проведення он-лайн оптимізації. Он-лайн оптимізація – це використання автоматизованої системи, що регулює роботу заводу на основі планування продуктів і виробничого контролю, задля максимізації прибутку та мінімізації втрат при виробництві.

Розглядаючи роботу модуля аналізу забруднення навколишнього середовища технологічним процесом, можна виділити наступні кроки (рис. Г.7):

- 1) Першим кроком є вибір відповідних потоків. Вплив на навколишнє середовище хімічного процесу викликаний потоками, що входять та виходять із цього процесу. Таким чином, саме вони враховуються при аналізі індексу забруднення. У програмі

вибір цих потоків відбувається автоматично на основі даних, отриманих з модуля симуляції процесу.

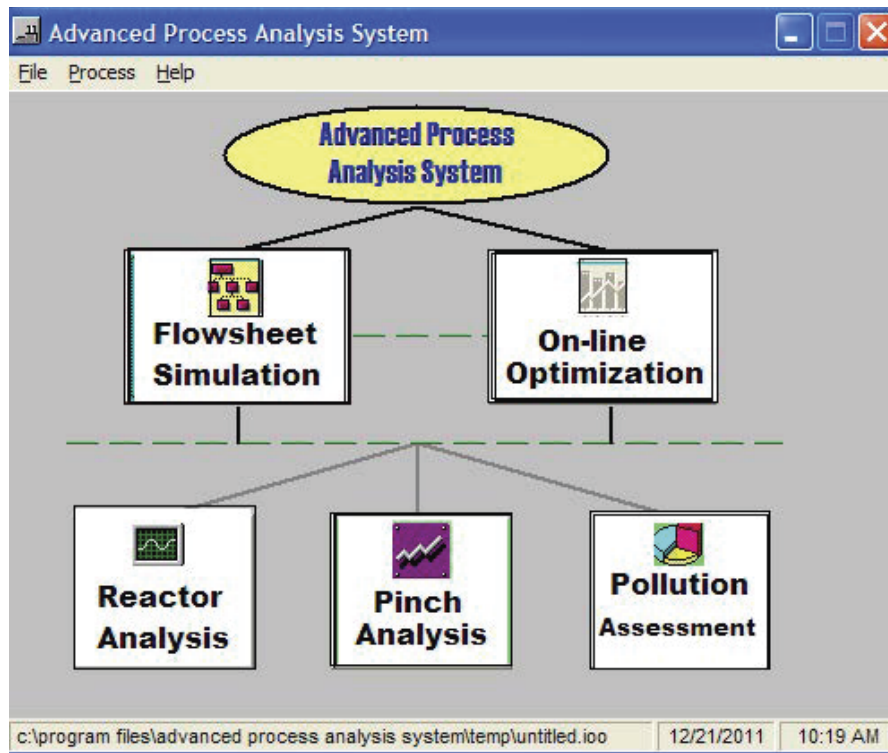


Рис. Г.6. Головне вікно Advanced Process Analysis System

- 2) Наступним кроком в аналізі індексу забруднення необхідно класифікувати вихідні потоки на «продукти» і «не продукти». Всі потоки, які або продаються як товар, або використовуються в наступних процесах у виробничому об'єкті вважаються потоками продуктів. Всі інші вихідні потоки, які потрапляють у навколишнє середовище, розглядаються як відходи. Всі відходи вважаються такими, що забруднюють навколишнє середовище. На відміну всі продукти, розглядаються, як такі, що мають нульовий вплив на навколишнє середовище.

Індекс забруднення потоку залежить від його складу. Дані про склад потоку отримуються із результатів он-лайн оптимізації, виконаної раніше. Також, вони можуть бути представлені у вигляді молярної витрати. Остання необхідна інформація – це відносні вагові коефіцієнти процесу. Ці значення залежать від місця розташування заводу і його навколишніх умов. Наприклад, ваговий коефіцієнт для фотохімічного окислення вище в районах, які страждають від смогу.

Виконавши всі вищеназвані кроки можна запускати програму аналізу. Для розрахунку значення індексу забруднення використовується *WAR* алгоритм. Розраховуються показники забруднення шести типів. Три з них базуються на внутрішній екологічній ефективності, а три інших – на зовнішній. Чим вище отримані значення цих індексів, тим вище потенційний вплив процесу на навколишнє середовище.

Програма також розраховує індекси забруднення для кожного з потоків процесу (рис. Г.8). Ці значення допомагають при ідентифікації потоків, які роблять більший внесок в загальний вплив забруднення процесу. Відповідно до отриманих даних можна ввести прийнятні зміни для зменшення вмісту забруднюючих речовин цими потоками.

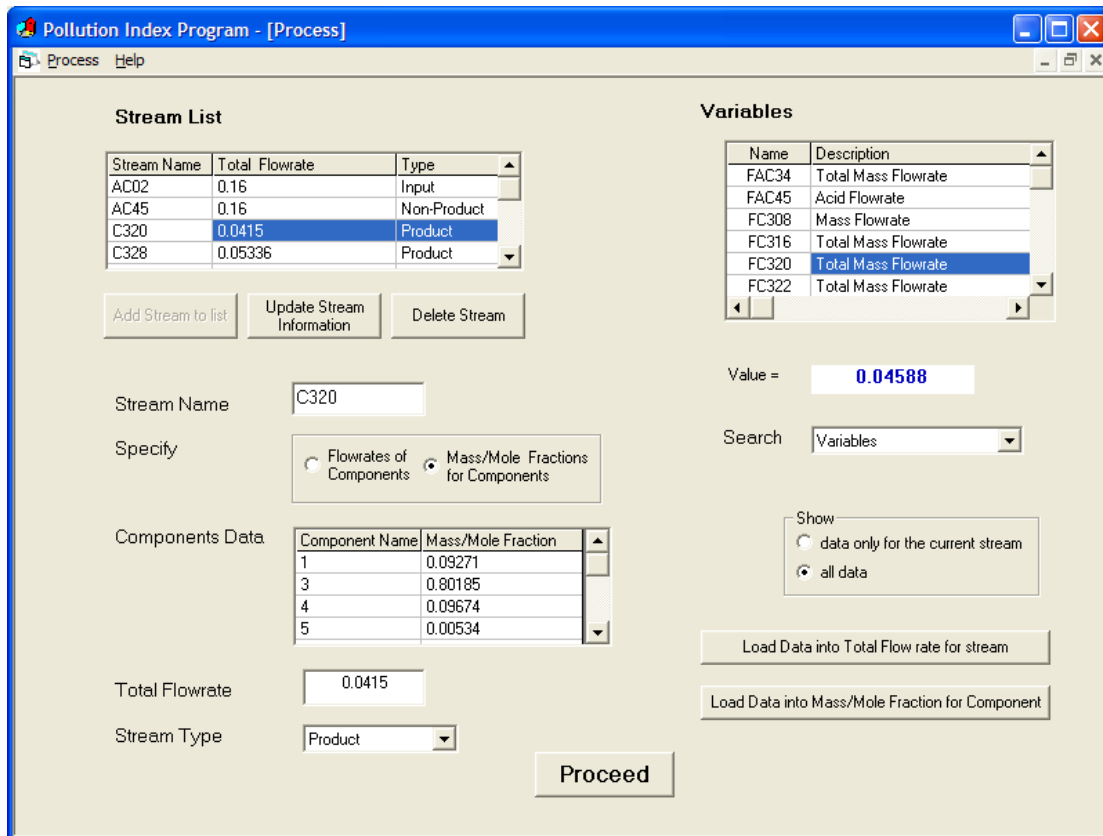


Рис. Г.7. Вікно налаштування модуля аналізу індексу забруднення в програмі *Advanced Process Analysis System*

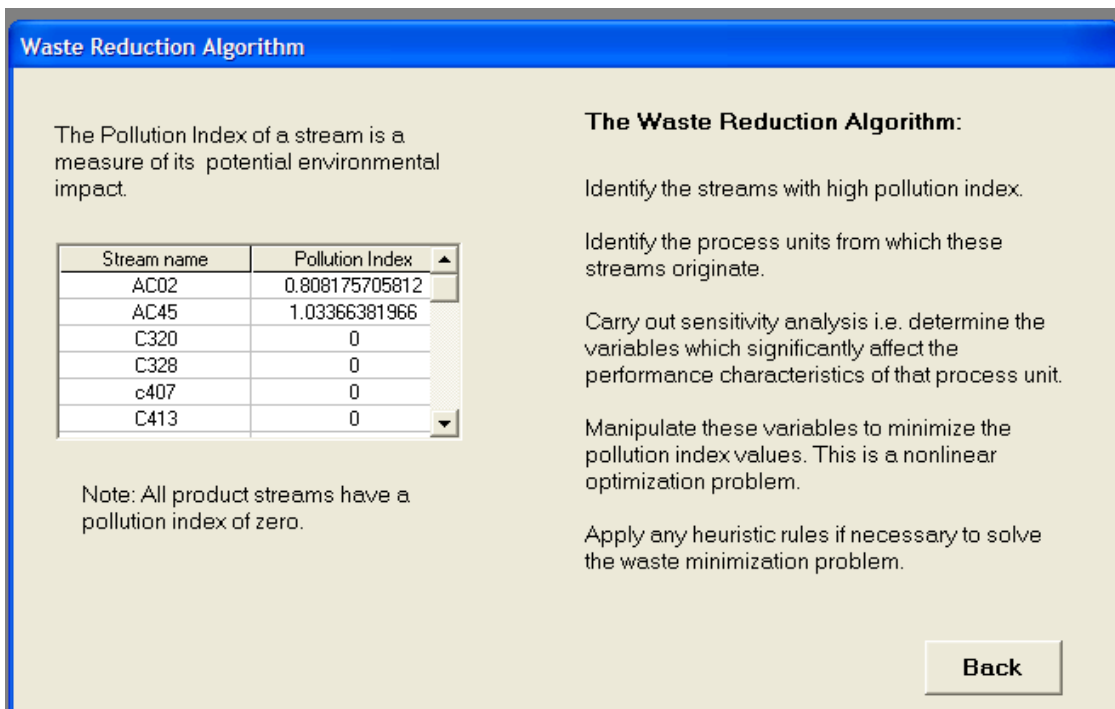


Рис. Г.8. Приклад розрахунку індексів забруднення по кожному компоненту

Кожен запуск оптимізації процесу супроводжується розрахунком індексу забруднення. Нові значення індексу забруднення порівнюються зі старими даними. Порівняння показує, як зміна умов процесу впливає на навколишнє середовище. Таким чином, програма може бути використана в безперервному режимі моніторингу цього процесу.

Програма ENVOPExpert

Інтелектуальна система *ENVOPExpert* автоматизує процес аналізу задля мінімізації утворення відходів в технологічних установках. Вона має вбудовану експертну систему *G2 (Gensym)*, яка в свою чергу пов'язана з симулятором процесу для аналізу рівня відходів та оптимізації процесу.

ENVOPExpert була реалізована на об'єктно-орієнтованій мові програмування. З урахуванням інформації про процес у вигляді технологічної схеми, хімії процесів та інформації про склад потоків, вона може автоматично виявляти компоненти, які є відходами в процесі, досліджувати їхнє походження та пропонувати альтернативні варіанти схеми для усунення або зведення їх до мінімуму.

Додаток Д

Приклади застосування системної динаміки

Д.1. Оборнені зв'язки в моделях системної динаміки

Моделі системної динаміки представляють широкі можливості для реалізації оборнених зв'язків, які наряду з рівнями і потоками, часовими затримками і нелінійностями визначають динаміку системи. Фактично найбільш складна поведінка системи зазвичай є результатом взаємодії оборнених зв'язків між компонентами системи, а не результатом складності компонентів безпосередньо. Вся динаміка є результатом взаємодії двох типів петель оборненого зв'язку, позитивної (або самозміцнюваної) і негативної (або самокорегуючої).

Негативні оборнені зв'язки протидіють змінам. Наприклад, більш привабливий для життя регіон – більша імміграція з інших областей буде примножувати безробіття, збільшувати ціни, переповнювати школи, збільшувати кількість пробок на дорогах, доки це не знизить привабливість регіону до привабливості інших місць, де живуть люди. Ці петлі описують процеси, які мають тенденцію обмежувати зміни, тенденцію пошуку балансу і рівноваги.

Позитивні оборнені зв'язки являються зміцнюючими. Візьмемо класичний приклад динаміки популяції курей. Звісно, що більша кількість курей несе більшу кількість яєць, з яких з'являються нові кури і т. д. Причинна діаграма такого процесу наведена на рис. Д.1.

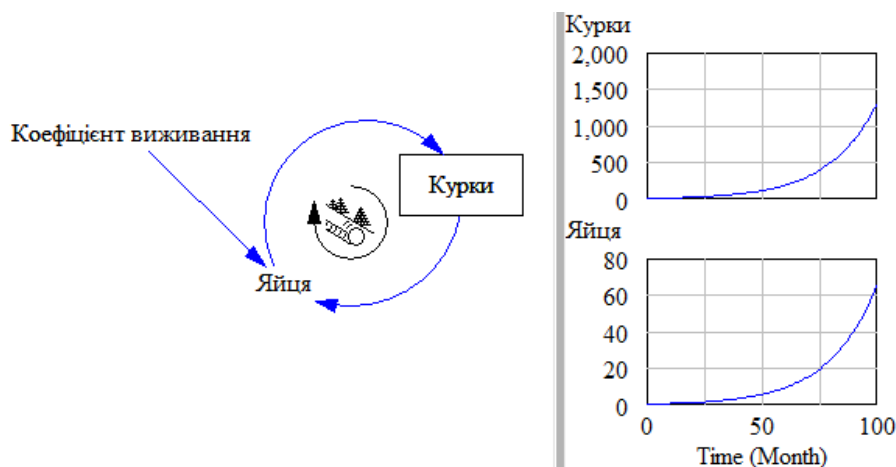


Рис. Д.1. Позитивний оборнений зв'язок

Якби ця петля була єдиною дією у системі «курка - яйце», кількість курок і яєць зростало б експотенційно. Звичайно, жодна реальна кількість не може зростати необмежено, тому повинні бути обмеження зростання. Ці обмеження реалізуються завдяки негативним оборненим зв'язкам.

Негативні зв'язки протидіють змінам. Оскільки чисельність курок зростає, різні від'ємні петлі будуть намагатися збалансувати цю чисельність. Один класичний приклад оборненого зв'язку наведено на рис. Д.2. Чим більше курок, тим частіше вони будуть намагатися перебігати проїзджу дорогу. Якщо на дорозі є рух, більша кількість перетинів дороги буде призводити до зменшення кількості курок (відповідно до

від'ємної полярності для зв'язку між дорожніми перетинами і кількістю курок). Збільшення кількості курок збільшує небезпеку дорожніх перетинів, які знижують кількість курок. Якби від'ємний обернений зв'язок «дорога – курки» був єдиним, кількість курок б поступово знижувалась би до того часу, що не залишилось жодної курки.

Усі системи, незалежно від складності, складаються з великої кількості позитивних і негативних обернених зв'язків, і вся динаміка є результатом взаємодії петель цих зв'язків друг з другом. Не дивлячись на те, що може існувати лише два типи петель оберненого зв'язку, моделі можуть містити тисячі петель обох типів, що поєднані друг з другом за умов багатократних часових затримок і нелінійностей. Інтуїція може дозволити вивести динаміку ізольованих зв'язків із цієї множини петель, проте коли ці петлі взаємодіють багатократно, не так просто визначити майбутню динаміку.

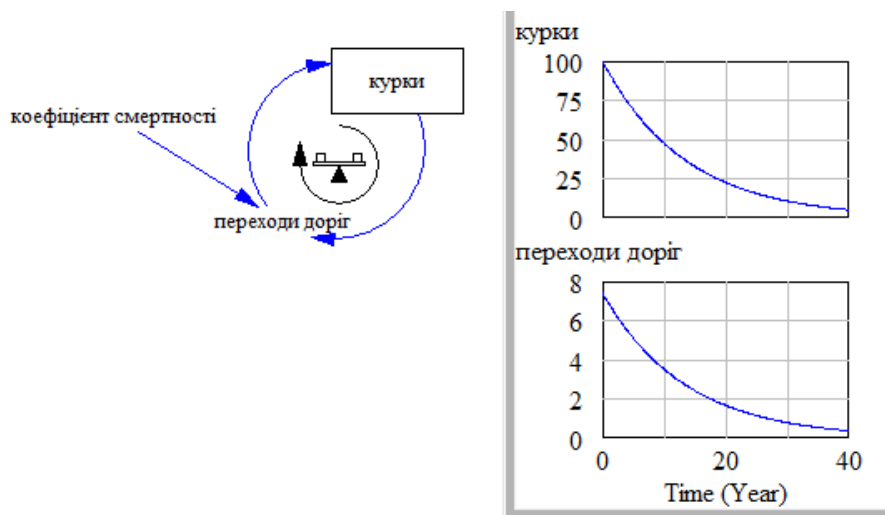


Рис. Д.2. Негативний обернений зв'язок

Щоб повніше відобразити потужність методів системної динаміки модифікуємо попередній приклад про курки та яйця. Як відомо, після відкладення яйця повинен пройти деякий час, для того, щоб виникли курчата. Тому використаємо часову затримку при моделюванні даного процесу і водночас поєднаємо обидві моделі – курки та яйця (позитивний обернений зв'язок) та курки й її смерті від переходу дороги (негативний обернений зв'язок). Взявши за початкову кількість курок 10 і припустивши, що гине кожна друга курка, отримуємо наступні результати (рис. Д.3).

На графіку видно характерні осциляції, що викликані дією обернених зв'язків і затримкою. Кількість курок (нижня крива) в початкові одиниці часу (до того як почали прокльовуватись курчата) зменшується під дією від'ємного оберненого зв'язку «курки – перетин доріг». Далі починає впливати зв'язок «курки – яйця» і призводить до збільшення кількості курок. При цьому результат зменшення чисельності курок, який відбувався раніше, відображається на поточній кількості курок через позитивний обернений зв'язок також з затримкою. Далі процес повторюється. Також на графіку спостерігається характерне затухання коливання кривих, які відповідають значенням кількості курок і їх стабілізація на рівні 5. Останнє свідчить про те, що система перейшла в новий, стійкий стан.

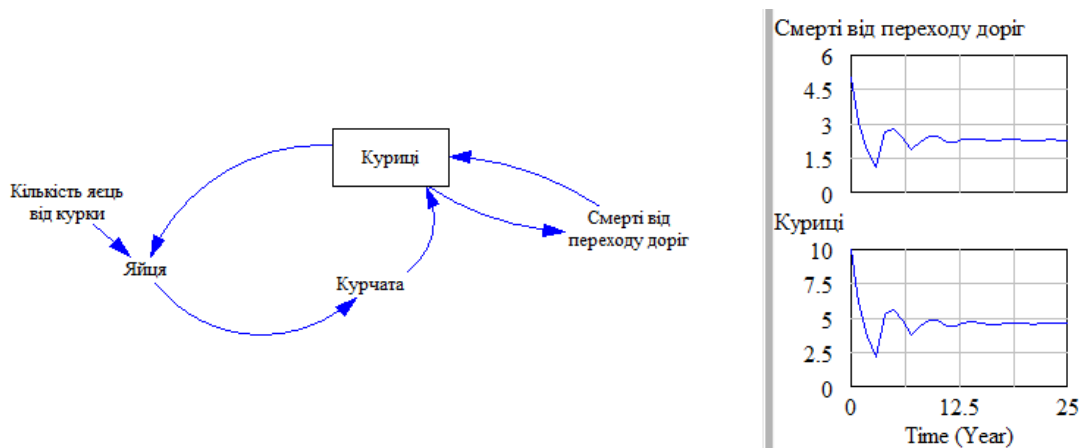


Рис. Д.3. Результат моделювання «Яйця – курки – перетин дороги»

Таким чином, на цьому примітивному прикладі були отримані ті ж самі закономірності, які спостерігаються в демографічних системах держав після війни – хвильові зміни чисельності населення.

Д.2. Застосування методів та засобів системної динаміки до аналізу розвитку областей України

Моделювання регіональних процесів

Розглянемо можливість застосування методів системної динаміки до дослідження еколого-економічних систем на прикладі областей України. Для цього пропонується спрощена модель регіону-області, яка надалі використовується для оцінювання різних стратегій сталого розвитку та вибору найефективніших з них.

Для регіону, як об'єкту моделювання, характерні наступні риси:

- Слабкість теоретичних знань, якісним характером знань про систему, відсутністю теорії розвитку регіональних утворень.
- Високий рівень невизначеності вхідної інформації.
- Розрізняють внутрішню і зовнішню невизначеність. Внутрішня невизначеність – це сукупність факторів, які повністю не контролюються особою, що приймає рішення, проте дана особа може впливати на них (наприклад, внутрішня соціально-економічна ситуація, фактори ризику та ін.). Зовнішня невизначеність визначається характером взаємодій з зовнішнім середовищем – це ті фактори, які знаходяться під слабким контролем особи, що приймає рішення (екологічна, демографічна, зовнішньополітична ситуація, поставка ресурсів зовні та ін.).
- Внаслідок цього результати рішення часто носять якісний характер і дозволяють судити про напрями розвитку динамічних процесів, виконувати аналіз їх стійкості.

Аналіз і моделювання соціально-економічних регіональних процесів необхідно виконувати з урахуванням наступних характерних особливостей:

- Регіон це складна слабо структурована система, системне моделювання якої передбачає виявлення великої кількості причинно-наслідкових зв'язків між

факторами, які розглядаються при описі складної системи, результати дії яких не завжди очевидні при прийнятті рішень (за висловом Дж. Форестера, територіальні системи контрінтуїтивні), при описі, структуризації об'єкта моделювання присутня велика кількість експертних знань.

- Регіональні системи – стохастичні, дослідження яких необхідно виконувати в умовах невизначеності та неоднозначності.
- Регіон – соціальна система, тому у ній домінує і враховуються природні і психологічні (пов'язані з інтересами людей та ін.) фактори. При прийнятті рішень необхідно враховувати довгострокові інтереси суспільства. Рівень розвитку регіону покликаний, в першу чергу, забезпечувати умови відтворення людського життя.
- Регіон – динамічна система. Дослідження процесів відтворення вимагає вивчення динаміки розвитку системи, аналізу процесів росту, з урахуванням загального життєвого циклу регіону і його частин (населення, підприємства, житловий фонд та ін.), адаптивної еволюції.
- Регіон є самокерованою системою. Керування відбувається через внутрішні організаційні процеси саморегулювання і засновано на зміні законів і методів внутрішнього керування. На слабкість адміністративних заходів, неефективність цільового фінансування та інших адміністративних програм, не пов'язаних з приведенням в дію економічних регуляторів вказував ще Дж. Форестер. Соціальні програми призводять до зсувів, порушень балансу.
- Існує конфлікт між цілями довгострокового планування і короткостроковими рішеннями, тому необхідна координація при прийнятті рішень.
- Умовами нормального розвитку в системі є підтримання економічної рівноваги (досягнення балансу використання ресурсів в системі).
- Соціально-економічна система має складну внутрішню структуру. В своєму дослідженні ми будемо розглядати наступне декомпозицію системи (рис. Д.4).

Тобто розглядаємо наступні підсистеми:

- населення;
- агропромисловий сектор;
- невиробнича сфера (сектор послуг);
- житловий фонд;
- екологічний стан;
- фінансовий стан і зовнішні економічні інвестиції.

Кожна підсистема взаємодіє з іншими за допомогою петель обернених зв'язків.

При розробці моделей регіонів України було використано, головним чином, дані Держкомстату України та Головними управліннями статистики відповідних областей (станом на 2010р.). Основним правилом при побудові моделей був принцип достатньої необхідності. Звісно, є бажання до моделі включити якомога більше наявних даних. Проте в більшості випадків це лише шкодить, оскільки при більшій деталізації кількість обернених зв'язків зростає пропорційно ступеню деталізації. Тому потрібно або розробляти окремий програмний комплекс, що враховує всі наявні ресурси, підприємства окремого регіону, або навіть міста, або можна взяти за основу лише базові компоненти розвитку. В нашому дослідженні будемо розглядати лише основні компоненти. Нижче зображено склад кожної компоненти окремо, без урахування зв'язків з іншими компонентами.

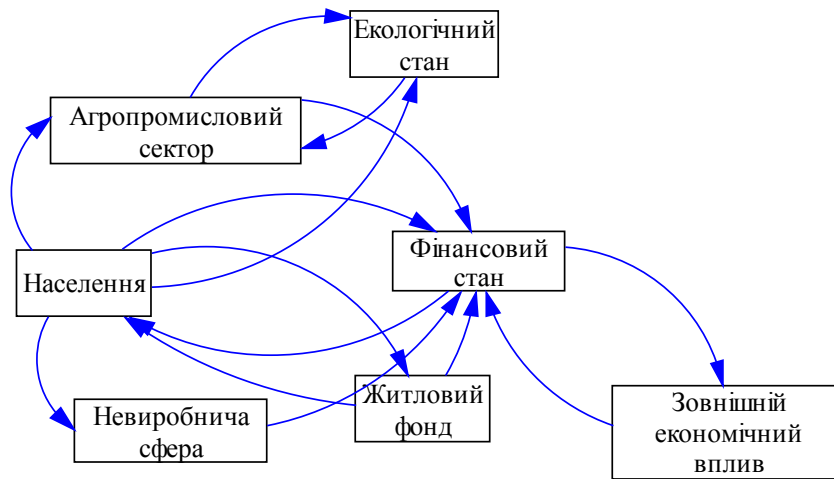


Рис.Д.4. Структура соціально-економічної системи регіону

Населення. Основним рівнем, що характеризує соціальну систему, є кількість населення. Очевидно, що основними потоками, що впливають на даний рівень буде кількість новонароджених і кількість померлих. Кількість померлих залежить від середньої тривалості життя, проте дана величина залежить від рівня медичних послуг, тому буде розглянуто в окремій компоненті. Також на склад населення впливає кількість людей, що іммігрують з області і що прибувають у ній. Оскільки нас не цікавить повний аналіз демографічної ситуації у регіоні, ми не будемо зважати на те, звідки і куди відбувається імміграція (за межі України чи у сусідні регіони). Також не враховуємо етнічний склад населення, його культурні особливості, політичні вподобання. Крім того, додатковим обмеженням на зростання населення є несуча спроможність (carrying capacity) території і привабливість регіону з точки зору екологічної чистоти, що буде враховано оберненим зв'язком з екологічною підсистемою. Основні взаємозв'язки всередині компоненти наведені на рис.Д.5.

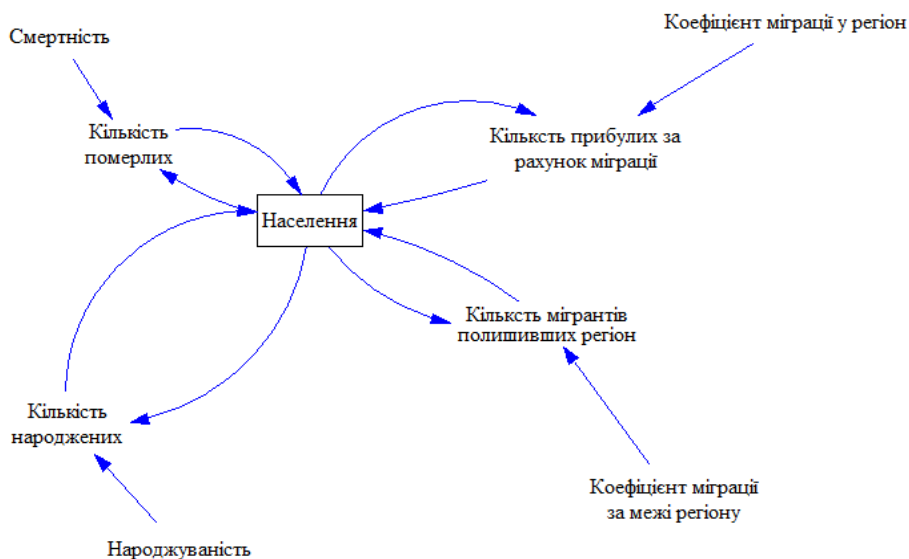


Рис. Д.5. Склад і внутрішні зв'язки підсистеми «Населення»

Невиробнича сфера (сектор послуг). Аналізуючи дані Держкомстату, видно, що основними невиробничими послугами по регіонах України (як в принципі і в світі) є медичні послуги, освітньо-наукові послуги (школи, професійно-технічні заклади освіти, університети, наукові установи) та туризм. Дана підсистема є однією з ключових для подальшого розвитку, оскільки залежно від розвитку медицини буде зростати чи зменшуватись рівень смертності, а також рівень виживання при народженні. В залежності від кількості спеціалістів з вищою освітою, і кількості інноваційних винаходів, які вони виробляють, буде розвиватись промисловість. Звісно дана підсистема сильно залежить від фінансового стану регіону, оскільки фінансування даних невиробничих секторів практично повністю державне (регіональне). Рівень розвитку туристичної галузі базується на природно-рекреаційному потенціалі, який є екологічною складовою. Основні компоненти підсистеми і взаємозв'язки між ними наведено на рис. Д.6.

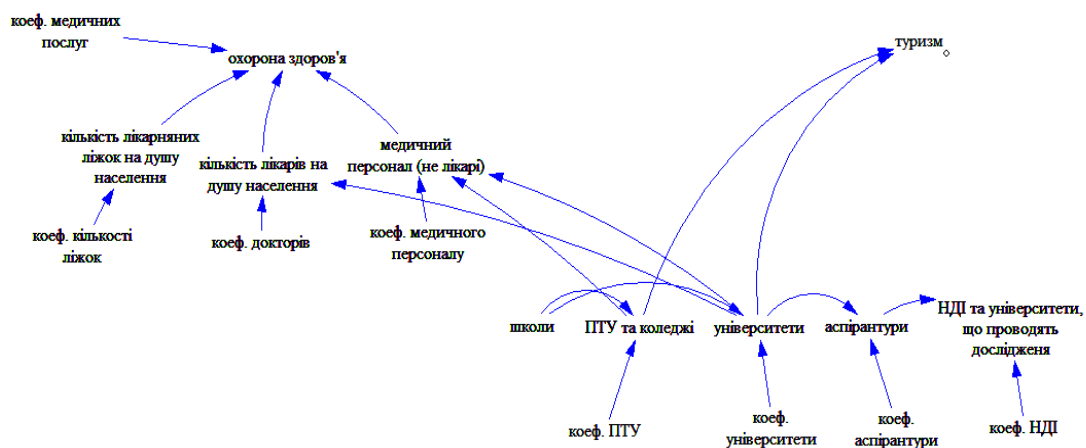


Рис. Д.6. Склад і внутрішні зв'язки підсистеми «Невиробнича сфера»

Агропромисловий сектор. Агропромисловий комплекс це, на даний момент, найбільш прибутковий сектор, практично кожного регіону України. Дана підсистема складається з двох основних компонентів – промисловий сектор і аграрний сектор. До промислового сектора відносять такі області економіки: добувна промисловість, харчова, легка, деревообробна, видавнича, нафтопереробна, хімічна, мінеральна, металургійна і машинобудівна промисловості. До аграрного сектору віднесено тваринництво, рослинництво і рибне господарство. Одразу видно, наскільки великий вплив даного сектору на усі інші, оскільки є зв'язок і з екологічною підсистемою – забруднення, зменшення несучої спроможності території, також є зв'язок з фінансовою, демографічною та не безпосередньо взаємодія з усіма іншими підсистемами. На рис Д.7, зображена уся підсистема, проте через значну кількість компонентів на загальній діаграмі регіону розрізу по складовим агропромислового сектору не зображено. Даний розріз замінено за допомогою додаткових коефіцієнтів. Інвестування у агропромисловий комплекс враховано у двох інших підсистемах – фінансовий стан (внутрішні інвестиції), та зовнішні фінансові інвестиції.

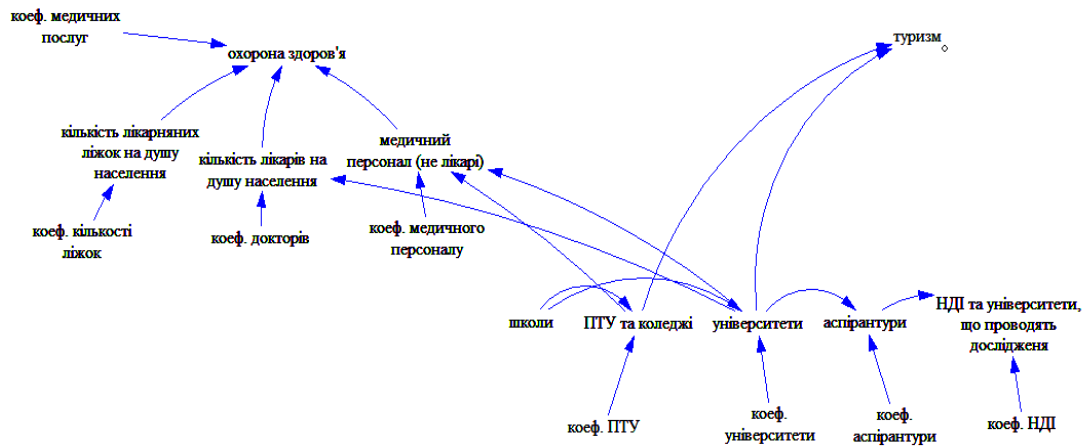


Рис. Д.7. Склад і внутрішні зв'язки підсистеми «Агропромисловий комплекс»

Житловий фонд. Дана підсистема має найпростішу структуру, проте її важливість на демографічну ситуацію складно переоцінити. Усі інвестиції буде розглянуто в підсистемах, що відносяться до фінансового стану регіону. До даної підсистеми буде включено, як основний рівень – кількість будівель. Також розглядається кількість введеного в експлуатацію житла та амортизація житла. На рис. Д.8 показано склад і внутрішні зв'язки даної підсистеми.



Рис. Д.8. Склад і внутрішні зв'язки підсистеми «Житловий фонд»

Екологічний стан. Вважатимемо, що екологічна компонента складається з природно ресурсного потенціалу, який складається з наступних показників:

- мінеральний;
- водний;
- земельний;
- лісовий;
- фауністичний;
- природно-рекреаційний.

Звісно не усі можливі екологічні забруднення можна передбачити за допомогою методів системної динаміки, наприклад, вибух Чорнобильської атомної електростанції, або вибух метанового газу у шахтах в Донецькому регіоні передбачити не можливо.

Проте можливу кількість небезпечних речовин, аналізуючи передісторію та розвиток промисловості, кількість людей врахувати цілком реально. Відповідно буде оцінено вплив забруднень на природний потенціал областей і подальшу несучу спроможність. Склад і внутрішні зв'язки підсистеми зображено на рис. Д.9. Слід зауважити, що аналогічно до агропромислового комплексу, зважаючи на велику кількість складових у підсистемі, замість усієї підсистеми буде розглянуто її спрощений вигляд, з урахуванням структури за допомогою коефіцієнтів. Екологічна система взаємодіє з більшістю підсистем регіону, в основному з агропромисловим комплексом. Забруднення від промисловості впливає на природно-рекреаційний показник регіону, розвиток сільського господарства і виробництва зменшуються розміри водного, земельного показнику. Видобувна галузь безпосередньо зменшує мінеральний показник регіону. Вирубання дерев з подальшою їх обробкою або продажем зменшує розміри лісистості регіону. На відновлення властивостей природно-ресурсного потенціалу потрібні кошти, які мають надходити з бюджету регіону. Також зроблено спробу врахувати в моделі можливі виснаження ресурсів і ґрунтів.



Рис. Д.9. Склад і внутрішня складова підсистеми «Екологічний стан»

Фінансовий стан і зовнішні інвестиції. Дана підсистема складається з декількох величин таких як, валовий регіональний продукт і внутрішні та зовнішні інвестиції, значення експорту і імпорту. Окремо ця підсистема не розглядається, оскільки найбільш важливою є взаємодія між компонентами цієї підсистеми з усіма іншими підсистемами. Важливість інвестицій (внутрішніх і зовнішніх) може бути показана через їх вплив на весь агропромисловий сектор.

Нарешті можна перейти до загальної моделі регіону (рис. Д.10), що складається з розглянутих вище підсистем та зв'язків між ними. Як вже зауважувалось, необхідність точно визначити взаємозв'язки між елементами підсистем набагато важливіше ніж детально відобразити окремі компоненти. Саме тому в основній моделі не буде детального зображення схем агропромислового комплексу і екологічної складової (не буде надано розрізу галузі промисловості і виду потенціалу). Їх відсутність буде компенсована відповідними коефіцієнтами. Природно-ресурсний потенціал регіону на початку моделювання можна обраховувати за допомогою нижче наведеної таблиці Д.1, у який детально показано розподіл областей України за природно-ресурсним потенціалом.

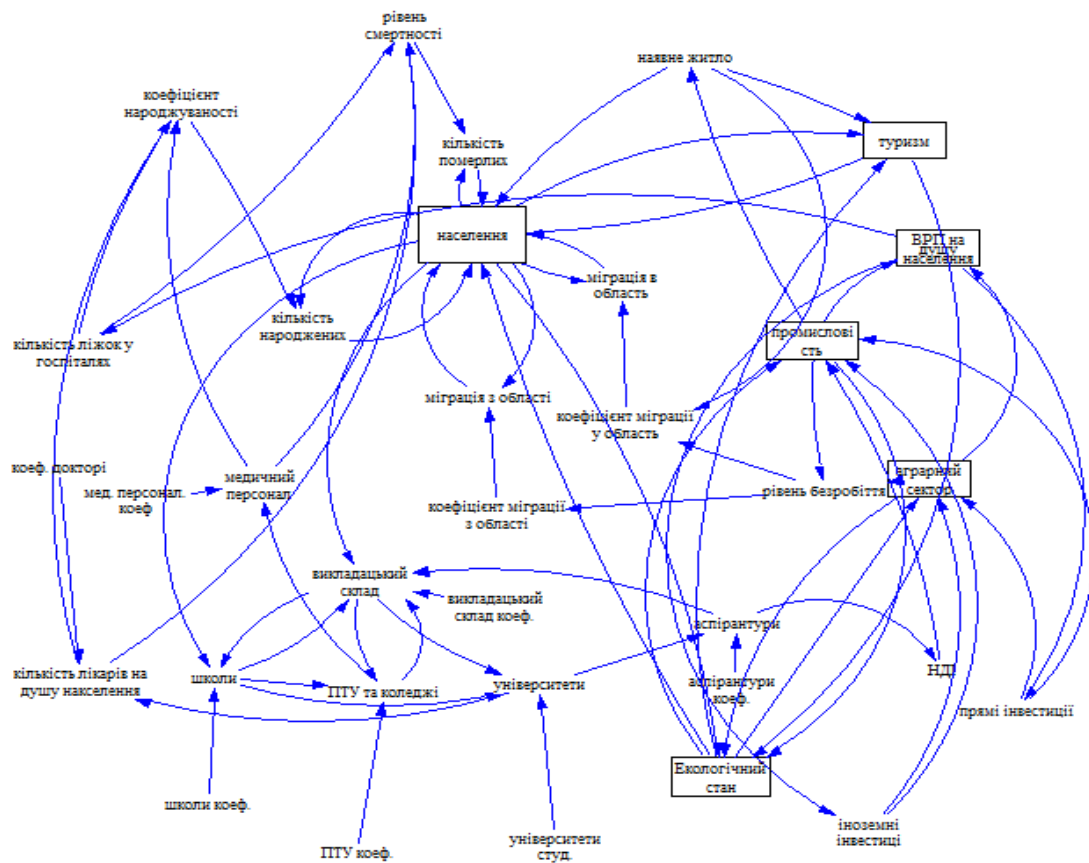


Рис. Д.10. Модель розвитку регіону

Виходячи з даної таблиці очевидно, що специфіка розвитку кожного регіону абсолютно різна, і для моделювання ресурсного середовища потрібно буде використовувати різні коефіцієнти. Подальші уточнення щодо вибору коефіцієнтів будуть вказані при розгляданні регіонів.

Обрання стратегій розвитку регіонів

Для обрання оптимальної стратегії розвитку кожного регіону було проаналізовано «Стратегію економічного та соціального розвитку» кожного регіону – документ, наявний на офіціальних веб-сайтах обласних адміністрацій. Незважаючи на те, що для кожного регіону було заявлено різні стратегії, основні елементи у кожній стратегії однакові. Для аналізу розвитку регіонів було обрано наступні чотири стратегії.

1. *Стратегія «Покращення демографічної ситуації».* Незважаючи на очікування вдалих результатів від застосування даної стратегії, проведений аналіз показав, що це не зовсім так. Оскільки за рахунок внутрішніх ресурсів неможливо швидко прискорити зростання населення, необхідно відкрити кордони з метою залучення великої кількості мігрантів. Це призведе не лише до виникнення великої кількості очевидних соціальних проблем, але й до зовсім неочевидних економічних та екологічних проблем.

2. *Інноваційна стратегія.* Під даною стратегією будемо розуміти лише збільшення обсягів інвестування у інноваційну діяльність. Для більшості регіонів ця

стратегія веде до сталого економічного розвитку, проте практично не покращує демографічну ситуацію.

Таблиця Д.1

Розподіл областей за природно-ресурсним потенціалом

Область	Значення інтегрального показника	Мінеральний	Водний	Земельний	Лісовий	Фауністичний	Природно-рекреаційний
АР Крим	0.4878	0.065	1	0.778	0.223	0.369	1
Вінницька	0.2927	0.007	0.126	1	0.275	0.392	0.053
Волинська	0.1382	0	0.079	0.193	0.63	0.127	0.041
Дніпропетровська	0.8862	0.842	0.315	0.78	0.058	0.964	0.216
Донецька	1	1	0.395	0.655	0.097	0.34	0.305
Житомирська	0.2358	0.016	0.252	0.533	0.851	0.444	0.03
Закарпатська	0.2033	0.007	0.594	0	1	0	0.358
Запорізька	0.3171	0.008	0.603	0.619	0.03	0.613	0.132
Івано-Франківська	0.1789	0.017	0.569	0.042	0.927	0.03	0.17
Київська	0.3252	0.015	0.283	0.297	0.253	0.478	0.376
Кіровоградська	0.2439	0.035	0.141	0.394	0.084	0.439	0.019
Луганська	0.7154	0.727	0.397	0.311	0.147	0.369	0.175
Львівська	0.3008	0.093	0.68	0.265	0.972	0.119	0.257
Миколаївська	0.2358	0.008	0.488	0.62	0	0.681	0.035
Одеська	0.3008	0.005	0.197	0.923	0.084	0.41	0.235
Полтавська	0.2846	0.043	0.172	0.817	0.219	1	0.047
Рівненська	0.1463	0.008	0.063	0.208	0.652	0.291	0.002
Сумська	0.2195	0.008	0.206	0.528	0.454	0.688	0.038
Тернопільська	0.1707	0.001	0.059	0.464	0.204	0.031	0
Харківська	0.3496	0.066	0.282	0.789	0.37	0.634	0.33
Херсонська	0.2358	0.003	0.474	0.628	0.039	0.847	0.045
Хмельницька	0.2195	0.008	0.149	0.617	0.212	0.197	0.028
Черкаська	0.2439	0.017	0.161	0.653	0.298	0.644	0.082
Чернівецька	0.1057	0.006	0	0.067	0.352	0.005	0.037
Чернігівська	0.2927	0.042	0.262	0.713	0.559	0.873	0.145

3. *Інноваційно-соціальна стратегія.* Дана стратегія є розширенням продовження попередньої стратегії. Але окрім виключного фінансування інноваційних досліджень у цій стратегії фінансуються також заклади охорони здоров'я і соціальної сфери. Незважаючи на те, що економічний розвиток регіонів у перші роки набагато повільніший у порівнянні з попередніми стратегіями отримані результати вказують на можливість прийняття даної стратегії, як стратегії сталого розвитку регіону.

4. *Стратегія покращення економічних показників.* Неофіційна сьогоденна стратегія. Більшість інвестицій вкладаються у розвиток економіки, практично не фінансуючи наукову діяльність і заклади охорони здоров'я соціальної сфери. Показано, що дана стратегія веде до колапсу.

Таким чином, на основі законодавчих актів України, що регламентують створення стратегій регіонального розвитку, досвіду великої кількості регіонів в інших країнах, які розробили свою регіональну стратегію сталого розвитку, було обрано для дослідження методами системної динаміки чотири найбільш характерні стратегії розвитку областей України: демографічну, інноваційну, науково-соціальну та промислову.

Аналіз розвитку регіонів України при застосуванні обраних стратегій

Аналіз обраних стратегій для областей України було проведено на основі побудованої моделі системної динаміки регіонів, що була реалізована в програмному продукті Vensim. Було проведено велику серію модельних експериментів по вивченню впливу прийнятих стратегій на розвиток всіх областей України. Розглянемо отримані результати на прикладі Вінницької та Волинської областей та проаналізуємо їх.

Вінницька область

Згідно даних головного управління статистики Вінницької області вартості основних засобів галузей регіональної політики, що представляють інтерес для дослідження, розподілені наступним чином (рис. Д.11).

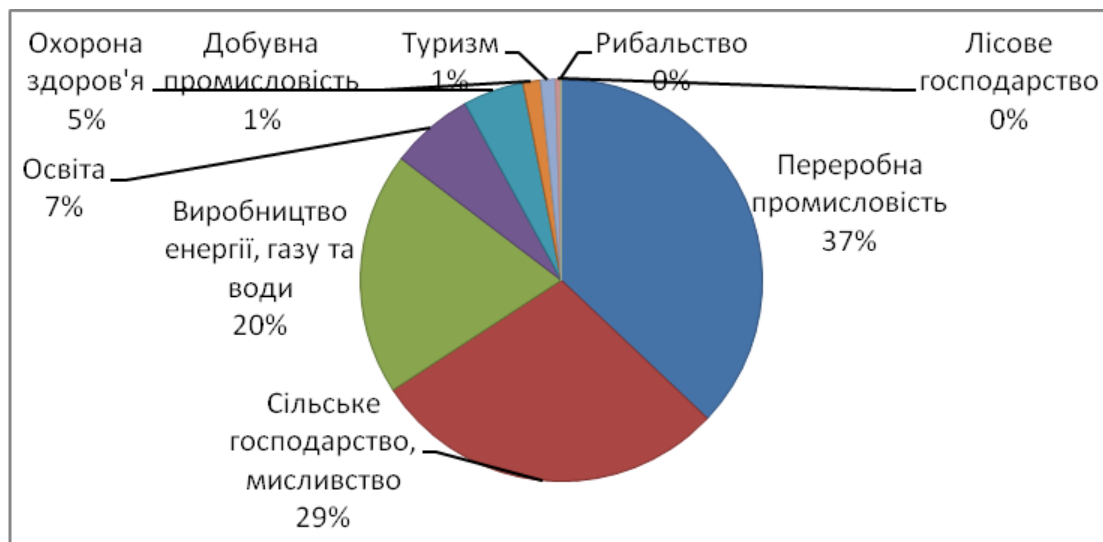


Рис. Д.11. Розподіл вартості основних засобів у Вінницькій області

Розподіл вартості основних засобів показує, що основними галузями є переробна промисловість і сільське господарство, що зменшує ризик впливу виснаження невідновлюваних ресурсів на економіку регіону. Достатньо велика кількість основних засобів закладів освіти і охорони здоров'я дозволяє проводити інноваційну політику в області і ставити стратегічні цілі, щодо покращення демографічної ситуації шляхом збільшення середньої тривалості життя

На рис. Д.12 показано динаміку валового регіонального продукту області при різних значеннях стратегії. Видно, що при нинішній політиці ВРП, в середньому буде зростати. При чому періоди збільшення будуть змінюватись періодами зменшення продукту. Дана ситуація пов'язана з поступовим виснаженням ресурсів (як і для добувної промисловості, так і для аграрного комплексу) на відтворення або на зміну орієнтації промисловості потрібний додатковий час. Кількість населення (рис. Д.13) буде постійно зменшуватись без жодних натяків на можливу зміну У випадку стратегії 1, на протязі перших 15-20 спостерігається значне зростання величини валового продукту, що виникає через значно збільшену інвестиційну привабливість регіону і збільшення кількості некваліфікованої недорогої робочої сили, проте у наступні 10 років даний рост повністю нівелюється значним погіршенням екологічного стану (рис. Д.14) і зменшенням кваліфікованих працівників.

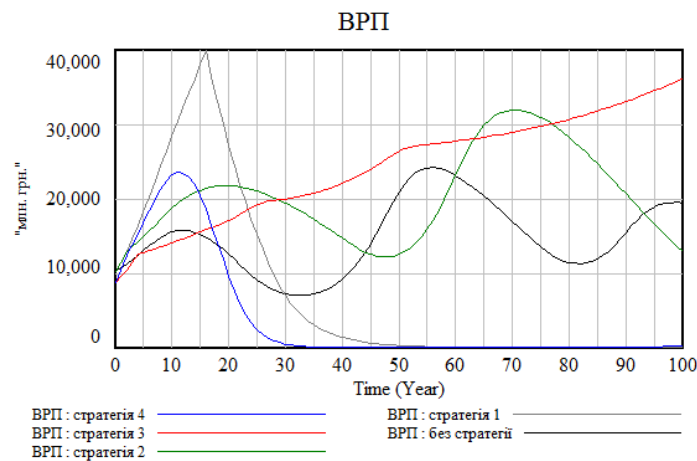


Рис. Д.12. Динаміка валового регіонального продукту за різних стратегій

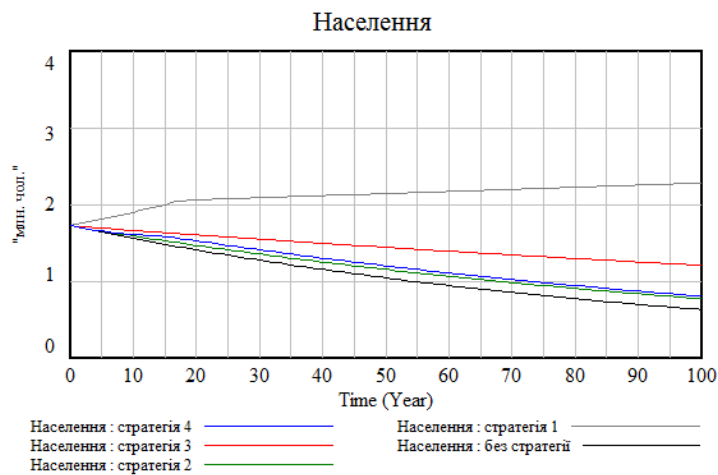


Рис. Д.13. Динаміка чисельності населення за різних вибраних стратегій

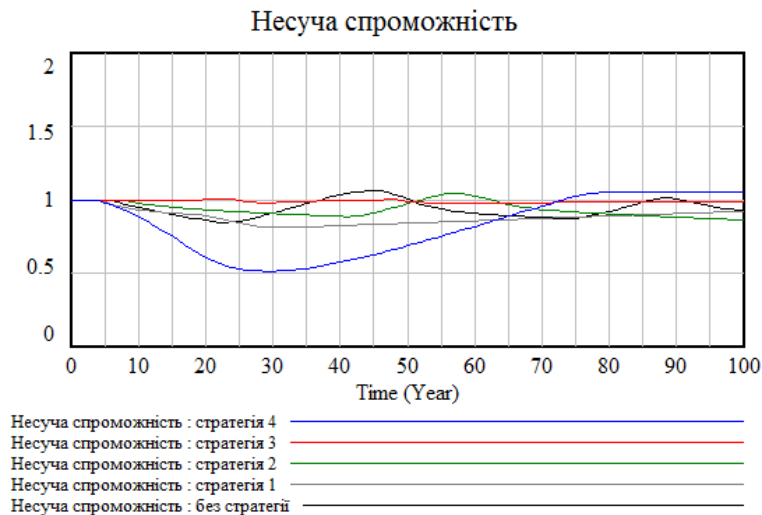


Рис. Д.14. Несуча спроможність регіону (екологічний стан) при різних стратегіях

У випадку застосування стратегії 2 за рахунок збільшення фінансування науки та освіти (рис. Д.15) зростає кількість кваліфікованих працівників, що дозволяє підвищити середнє значення зростання валового регіонального продукту і зменшити часи спаду економіки. Проте, не дивлячись на значне збільшення валового регіонального продукту. Найбільш вдалою для регіону видається стратегія 3. Саме достатнє збільшення фінансування сектора охорони здоров'я і освіти дозволяє призупинити зменшення населення до прийнятнотого рівня.

Не дивлячись на те, що спочатку зростання валового регіонального продукту при використанні стратегії 1 більше, величина ВРП при використанні стратегії 3 через 18 років стає рівною до ВРП при стратегії 1 і далі відбувається зростання без значних періодів спаду.

Остання четверта стратегія повністю показала власну неспроможність. Незважаючи на досить велике збільшення об'ємів валового регіонального продукту у перші десять років, після зменшення потоку зовнішніх інвестицій зростання ВРП призупинилось і почалося зменшення (рис. Д.15).

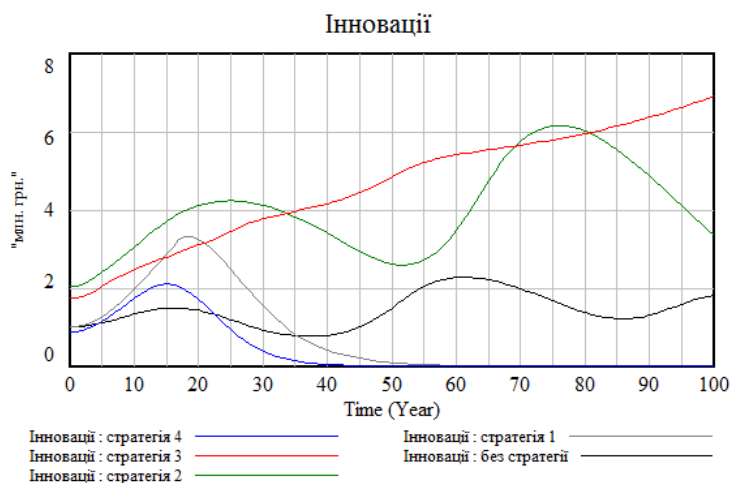


Рис. Д.15. Кількість коштів виділених на інноваційну діяльність за різних стратегій

Волинська область

Згідно даних головного управління статистики у Волинській області вартість основних засобів розподілена по галузям економіки, які нас цікавлять наступним чином (рис. Д.16).

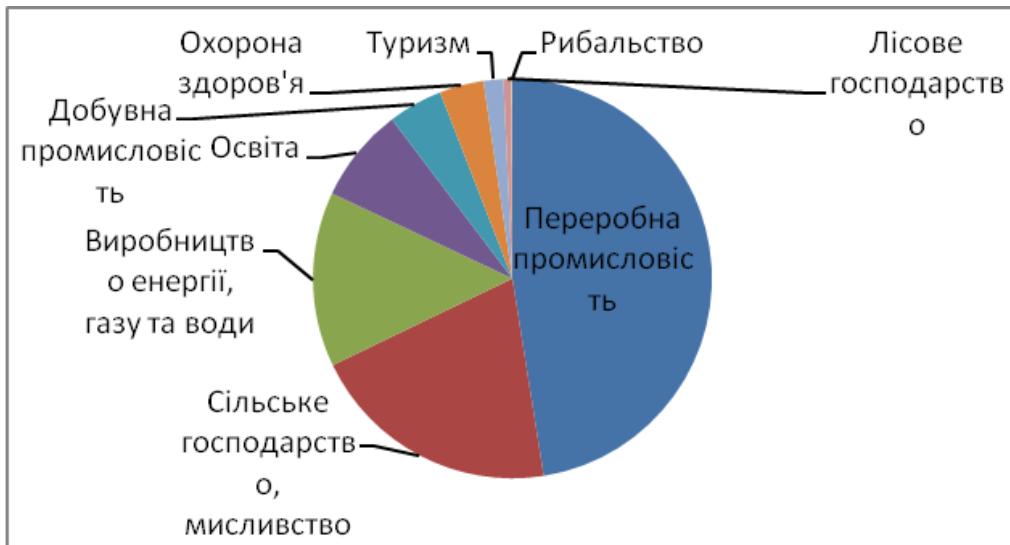


Рис. Д.16. Розподіл вартості основних засобів у Волинській області

Як видно економіка Волинської області не дуже сильно прив'язана до ресурсоемних технологій, тому екологічний стан в області, навіть у нинішній ситуації, при відсутності жодного впливу залишається достатньо непоганим (рис. Д.17). Валовий регіональний продукт у регіоні за нинішніх умов поступово збільшується з невеликою швидкістю і потім відбувається невелике зменшення (рис. Д.18).

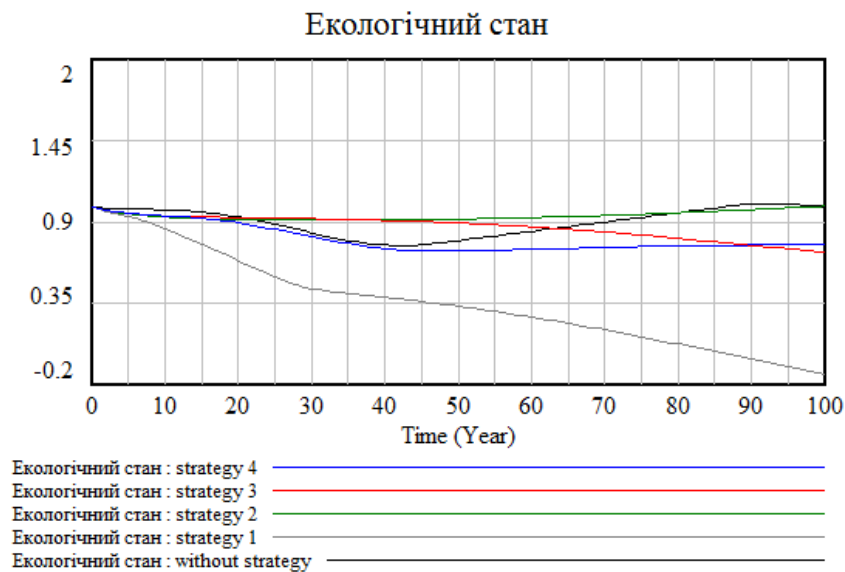


Рис. Д.17. Екологічний стан регіону при обраних стратегіях

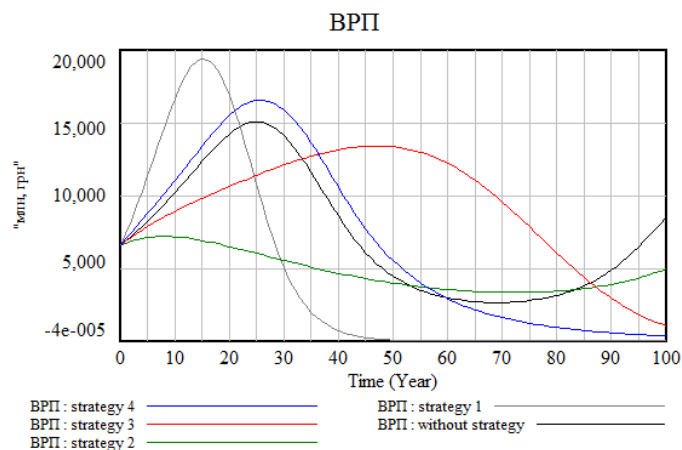


Рис. Д.18. Динаміка валового регіонального продукту за різних стратегій

Населення регіону, на відміну від більшості областей України практично не зменшується, як видно на рис. Д.19.

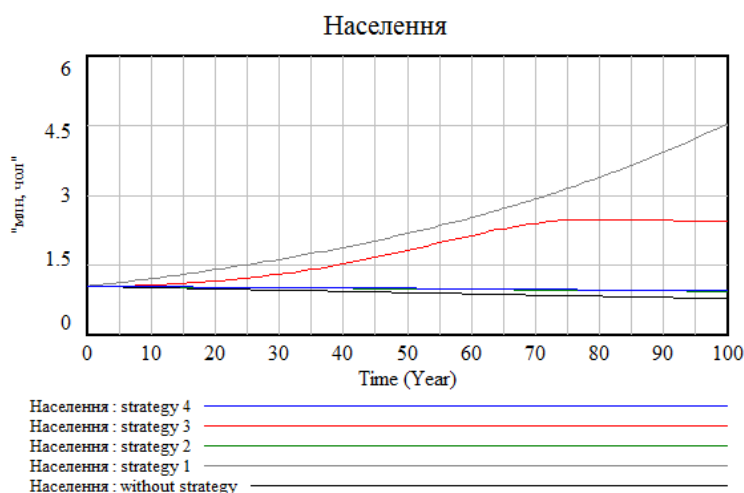


Рис. Д.19. Динаміка населення за різних стратегій

У випадку застосування стратегії 1 відбувається значне збільшення населення, що призводить до величезного виснаження екології регіону, що в свою чергу негативно відображається як на добувній промисловості так і на аграрному комплексі (через урбанізацію та інші процеси).

Застосування стратегії 2, незважаючи на зменшення величини валового регіонального продукту, дозволяє уникнути проміжків падіння регіонального продукту і залишає його практично постійним. Недоліком даної стратегії для області можна вважати невелику кількість закладів освіти в області, що обмежує можливу кількість спеціалістів. Кількість коштів виділених на інновації та освітню діяльність за різних стратегій наведено на рис. Д.20.

Комплексна стратегія 3 призводить до значного зростання ВРП і призупинення спадання демографічної ситуації у регіону, що, однак, обертається спаданням валового регіонального продукту через виснаження земель і погіршення екологічного стану. Кількість коштів виділених на медичні послуги наведено на рис. Д.21.

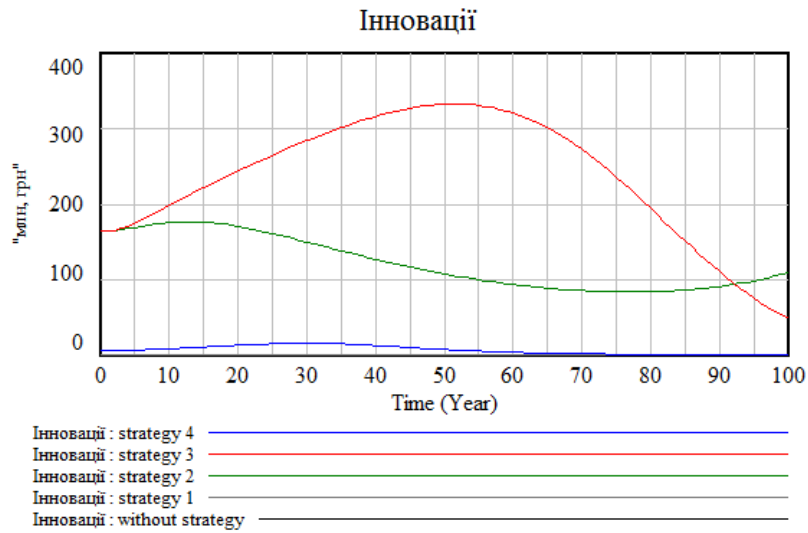


Рис. Д.20. Кількість коштів виділених на інновації за різних стратегій

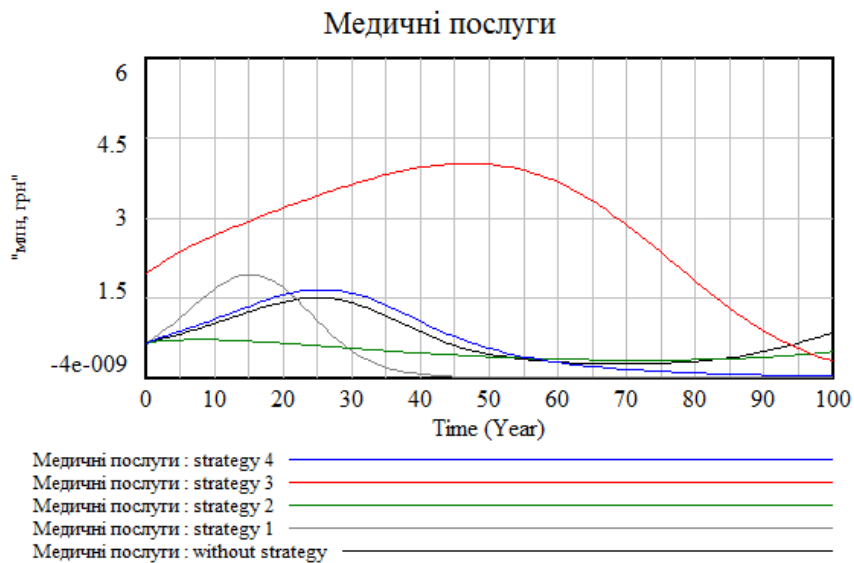


Рис. Д.21. Кількість коштів виділених на охорону здоров'я за різних стратегій

Дослідивши поведінку розвитку областей України із використанням розробленої моделі динаміки регіонів для обраних чотирьох сценаріїв було визначено, що промислова стратегія призводить до катастрофічних наслідків, незважаючи на те, що для перших десяти років моделювання дає оптимістичні результати. Аналогічний результат розвитку області маємо при застосуванні демографічної стратегії, що полягає у спробах максимально збільшити кількість населення, в основному за рахунок міграції. А от інноваційна і науково-соціальна стратегії показали можливість їх застосування для стійкого розвитку області.

ВИСНОВКИ

Системний аналіз складних хіміко-технологічних систем – це найважливіший етап дослідження хіміко-технологічних виробництв, мета якого знайти найкращий варіант проектного рішення при створенні нового або при реконструкції існуючого виробництва.

Оскільки ХТС слід розглядати як складні системи, що можуть бути формалізовані, то їх дослідження проводять із застосуванням сучасних методів та програмних засобів аналізу складних систем. Тому університетська підготовка бакалаврів, спеціалістів та магістрів із хіміко-технологічних спеціальностей повинна проводитись із урахуванням того, що вони повинні :

- знати методи системного аналізу складних ХТС;
- вміти обирати відповідні математичні та комп'ютерні моделі, що реалізують технологічні процеси та ефективні програмні засоби для рішення поставлених задач дослідження;
- вміти із системних позицій аналізувати отримані результати в процесі прийняття рішень щодо вибору найкращого варіанту технологічної схеми виробництва та режимів її функціонування.

Головна мета цього підручника полягає в тому, щоб надати студентам можливість засвоїти основні принципи та методи системного аналізу, що можуть бути застосовані до хіміко-технологічних об'єктів. Тому в підручнику докладно висвічується теоретичний матеріал, пов'язаний із моделюванням ХТС та аналізом її структури. Застосування сучасних програмних засобів є невід'ємною складовою процесу дослідження складних ХТС завдяки наявності обчислювальних модулів для моделювання практично будь-яких апаратів ХТС, баз даних по властивостях речовин та їх сумішей, методів розрахунку термодинамічних властивостей, а також обчислювальних процедур для розрахунку та аналізу схем із рециклами. В книзі представлені найвідоміші засоби для комп'ютерного моделювання та дослідження хіміко-технологічних процесів і продемонстровано можливості застосування цих програмних засобів на конкретних прикладах.

Крім того в підручнику надано інші методи дослідження, які можуть використовуватись при рішенні задач забезпечення сталості хімічних виробництв, підвищення їх еко-ефективності.

СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Згуровский М. З., Панкратова Н. Д. Системный анализ: Проблемы, методология, приложения. – Киев: Наук. Думка, 2005. – 743 с.
2. Згуровський М. З., Панкратова Н. Д. Основи системного аналізу: підручник. – К.: Видавнича група ВНУ, 2007. – 543 с.
3. Бугаева Л. М., Безносик Ю. О., Статюха Г. О. Системний аналіз хіміко-технологічних комплексів: Навчальний посібник. – Київ, Політехніка, 2014. – 132 с.
4. Системный анализ и принятие решений. Математическое моделирование и оптимизация объектов химической технологии в Mathcad и Excel: Учебное пособие / В. А. Холоднов, В. П. Решетиловский, М. Ю. Лебедева, Е. С. Боровинская — СПб. : СПГТИ (ТУ), 2007. – 433 с.
5. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов: Практическое руководство / В. А. Холоднов, В. П. Дьяконов, Л. С. Кирьянова, Е. Н. Иванова – СПб.: АНО НПО «Профессионал», 2003. – 480с.
6. Плис А. И., Сливина Н. А. Mathcad. Математический практикум для инженеров и экономистов: Учебное пособие. – М. : Финансы и статистика, 2003. – 656 с.
7. Гартман Т. Н., Клушин Д. В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учебное пособие – М. : Академкнига, 2006. – 416с.
8. Кафаров В. В., Мешалкин В. П. Анализ и синтез химико-технологических систем: Учебник для вузов.– М. : Химия, 1991. – 432 с.
9. Химико-технологические системы. Синтез. Оптимизация. Управление / Д. Бальцер, В. Вайс, В. К. Викторов и др. Под ред. И. П. Мухленова – Л. : Химия, 1986. – 424с.
10. Методы и средства автоматизированного расчета Химико-технологических систем: Учебное пособие / Н. В. Кузичкин, С. Н. Саутин, А. Е. Пунин и др. – Л. : Химия, 1987. – 152с.
11. Системний аналіз сталого розвитку: Навчальний посібник / В. П. Бех, Ю. В. Бех, М. В. Туленков, В. Л. Акуленко, Н. В. Крохмаль, Я. О. Чепуренко. За заг. ред. В. П. Бега, М. В. Туленкова – Мін-во освіти і науки України, Нац. пед. ун-т імені М. П. Драгоманова. – К. : МП Леся, 2015. – 512 с.
12. Питерсон Дж. Теория сетей Петри и моделирования систем. – М.:Мир, 1984 г. – 264 с.
13. Мараховский В.Б., Розенблюм Л.Я., Яковлев А.В. Моделирование параллельных процессов. Сети Петри. Курс для системных архитекторов, программистов, системных аналитиков, проектировщиков сложных систем управления. – СПб : Профессиональная литература, АйТи-Подготовка, 2014. – 400 с.
14. Форрестер Дж. Основы кибернетики предприятия (индустриальная динамика) – М. : Прогресс, 1971. – 340 с.
15. Форрестер Дж. Мировая динамика. – М : ООО «Издательство АСТ; СПб.: Terra Fantastica, 2003. – 379 с.

ПРЕДМЕТНИЙ ПОКАЖЧИК

Aspen Plus визначення властивостей суміші	149
Aspen Plus залежність тиску пари від температури	144
Aspen Plus моделювання екстракції кислоти	175
Aspen Plus моделювання «компресор-турбіна»	168
Aspen Plus моделювання конденсатора	165
Aspen Plus моделювання ректифікації	155
Aspen Plus моделювання системи розділення	171
Aspen Plus моделювання теплообмінник-випарник	140
Aspen Plus програма-симулятор	51, 140
Chemcad програма	70, 179
Chemcad розрахунок схеми синтезу етанолу	186-187
Chemcad розрахунок схеми конденсації метану	204-206
Hysys моделювання конверсії CO ₂	128
Hysys програма	65, 127, 186, 205
PROvision програма	67
Vensim програма	124
WAR алгоритм	88, 215, 226
Активність мереж Петрі	115
Алгоритм виділення комплексів	40
Аналіз досяжності мереж Петрі	116
Аналіз мереж Петрі	115
Аналіз системний	8
Аналіз структурний	40, 183, 199
Байпас	19
Баланс матеріальний	196
Безпека мереж Петрі	115
Визначення точки роси	151
Виконання мережі Петрі	111
Вплив потенційний екологічний	90, 218
Граф ХТС	26
Динаміка системна	119

Екстракція оцтової кислоти	175
Елемент ХТС	16
Елемент ХТС вхідний	18
Елемент ХТС вихідний	18
Емерджентність ХТС	23
Ємність позицій мережі Петрі	108
Жереб одиничний	103
Задача оптимізації ХТС	24
Задача розрахунку МТБ ХТС	25
Задачі аналізу ХТС	24
Задача синтезу ХТС	23
Збереженість	115
Зв'язки негативні обернені	231
Зв'язки позитивні обернені	231
Зв'язок технологічний зворотній	20
Зв'язок технологічний паралельний	19
Зв'язок технологічний послідовний	19
Змінні ХТС оптимізуючи	22
Змінні ХТС регламентовані	22
Зміст системного підходу	9
Ієрархія ХТС	23
Імітаційна модель	105
Індекси впливу	90, 219
Категорії впливу	89
Керованість ХТС	22
Класифікація впливів ЕРА	225
Комплекс в графі	26
Компресор – газова турбіна	168
Контур в графі	26, 185
Контурна степінь дуги	44
Маркування мережі Петрі	109
Матриця контурів	185, 202
Матриця перетворення	34

Матриця суміжності	27
Мережі Петрі	108
Метод Монте-Карло	106
Метод системної динаміки	120
Методи розрахунку декомпозиційні	25
Методи розрахунку інтегральні	25
Мови реального часу	107
Моделі детерміновані	25
Моделі статистичні	25
Модель ХТС математична	22
Моделювання конверсії оксиду вуглецю	128
Моделювання парціального конденсатора	165
Моделювання процесу ректифікації	155
Моделювання теплообмінник – випарник	139
Надійність системи	23
Обмеженість мереж Петрі	115
Оператори технологічні типові	16
Оптимальна множина розриваємих дужок	202
Паралельні процеси	107
Параметри конструктивні	16
Параметричність потоків	21
Перехід мережі Петрі	109
Перехід мережі Петрі дозволений	111
Перешкодозахищеність ХТС	23
Петрі мережі	108
Петрі мережі активність	115
Петрі мережі аналіз	115
Петрі мережі аналіз досяжності	116
Петрі мережі безпека	115
Петрі мережі виконання	111
Петрі мережі ємність позицій	108
Петрі мережі маркування	109
Петрі мережі обмеженість	115

Петрі мережі перехід	109
Петрі мережі перехід дозволений	111
Петрі мережі позиція	109
Петрі мережі структура	110
Підсистема організаційна	10
Підсистема технологічна	10
Позиція мережі Петрі	109
Порівняння <i>VLE</i> -моделей	161
Потоки моделей системної динаміки	121
Потоки технологічні	28
Потоки умовні	28
Прадерево комплексу	42, 204
Принципи системної динаміки	123
Програма універсальна моделююча	49
Програмний пакет COFE	223
Процес паралельний асинхронний	107
Процес паралельний незалежний	107
Процес паралельний підлеглий	107
Процес паралельний синхронний	107
Рівні моделей системної динаміки	121
Рівняння збереження впливу	218
Саморозвиток ХТС	13
Синергетика	13
Синтез послідовності розділення	171
Система формалізована	7
Система хіміко-технологічна	15
Система хіміко-технологічна замкнена	20
Складність ХТС	23
Список суміжності	27
Спрацьовування переходу	109
Сталий розвиток	12
Стійкість системи	13
Стійкість ХТС	22

Стратегія розробки ХТС	45
Структура мережі Петрі	110
Ступені свободи системи	31
Схема отримання етанолу	179
Схеми окислювальної конденсації метану	204-206
Типи елементів моделей системної динаміки	121
Форестер Дж.	119
Хіміко-технологічна система (ХТС)	15
ХТС аналіз	24
ХТС граф	26
ХТС елемент	16
ХТС елемент вихідний	18
ХТС елемент вхідний	18
ХТС емерджентність	23
ХТС замкнена	20
ХТС ієрархія	23
ХТС керованість	22
ХТС математична модель	22
ХТС надійність	23
ХТС оптимізація	24
ХТС перешкодозахищеність	23
ХТС розрахунок МТБ	25
ХТС саморозвиток	13
ХТС складність	23
ХТС синтез	23
ХТС стійкість	22
ХТС стратегія розробки	45
ХТС чутливість	22
Число випадкове	104, 105
Число ступенів свободи	22
Чутливість ХТС	22

СИСТЕМНИЙ АНАЛІЗ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ КОМПЛЕКСІВ : підручник /
Л.М. Бугаєва, Т.В. Бойко, Ю.О. Безносик. – КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2017. – 254 с.

У підручнику викладені методи та засоби системного аналізу, що можуть застосовуватись при дослідженні складних хіміко-технологічних систем та рішенні задач пов'язаних із сталими виробничими процесами. Надано багато прикладів рішення задач аналізу хіміко-технологічних процесів із використанням сучасних програмних засобів Aspen Plus, Hysys та Chemcad.

Підручник призначений в першу чергу для магістрів спеціальності «151 – Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології» при вивченні дисципліни «Системний аналіз». Компетенції, отримані студентами в процесі вивчення цієї дисципліни застосовуються ними при виконанні магістерської дисертації. Крім того, книга може бути корисною аспірантам, науковим працівникам та інженерам – всім, хто стикається із необхідністю дослідження складних хіміко-технологічних систем задля забезпечення їх еко-ефективності.

УДК 66.02:004.42(075.8)

ББК 35(075.8)

Б

ISBN

Навчальне видання

**БУГАЄВА Людмила Миколаївна
БОЙКО Тетяна Владиславівна
БЕЗНОСИК Юрій Олександрович**

СИСТЕМНИЙ АНАЛІЗ

ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ КОМПЛЕКСІВ

підручник

**BUGAEVA Liudmyla
BOYKO Tetiana
BEZNOSYK Yurii**

SYSTEM ANALYSIS

OF CHEMICAL-TECHNOLOGICAL SYSTEMS

textbook

Оформлення та комп'ютерна верстка
Л.М. Бугаєва, Ю.О. Безносик

Обкладинка
Н.М. Алексенко

Підп. до друку xx.xx.xxxx. Формат 70x100¹/₁₆
Гарн. Таймс. Друк офсетний. Папір офсетний.
Ум. друк. арк. xx.x
Наклад 300 прим.
Замовлення xxxx

Віддруковано ТОВ «НВО «Інтерсервіс»
вул. Бориспільська, 9, 02099

Відомості про авторів



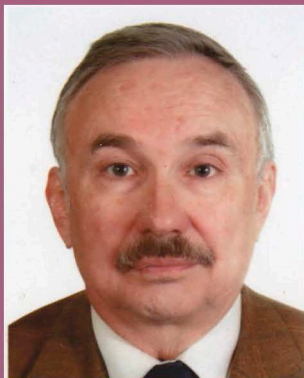
Бугаєва Людмила Миколаївна

кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського".
Галузь наукових інтересів - системний аналіз, автоматизація моделювання, методи штучного інтелекту та їх застосування в хімічній технології, інтелектуальні системи прийняття рішень, прикладні комп'ютерні системи в хімічній технології



Бойко Тетяна Владиславівна

кандидат технічних наук, доцент, завідувач кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського".
Галузь наукових інтересів - математичне моделювання процесів і систем, моделювання та техногенна безпека промислових підприємств, комп'ютерна хімія



Безносик Юрій Олександрович

кандидат технічних наук, доцент, доцент кафедри кібернетики хіміко-технологічних процесів Національного технічного університету України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського".
Галузь наукових інтересів - математичне моделювання хіміко-екологічних процесів та систем, енергозберігаючі та екологічні системи, системний аналіз, методи штучного інтелекту