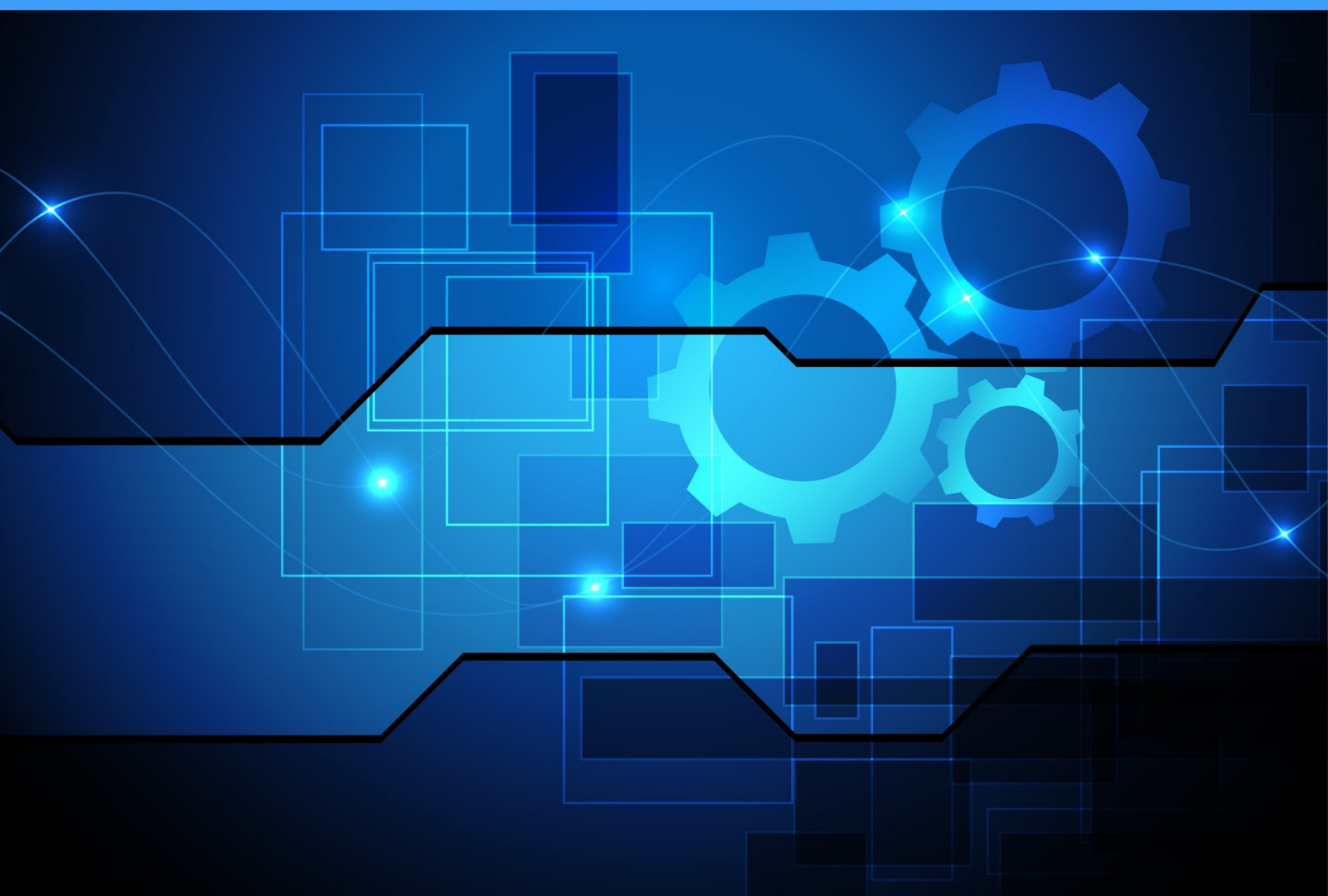


Э.Д. Иванчина, Е.С. Чернякова,
Н.С. Белинская, Е.Н. Ивашкина

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Э.Д. Иванчина, Е.С. Чернякова,
Н.С. Белинская, Е.Н. Ивашкина

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

*Рекомендовано в качестве учебного пособия
Редакционно-издательским советом
Томского политехнического университета*

Издательство
Томского политехнического университета
2017

УДК 66.02(075.8)

ББК 35.11я73

И23

Иванчина Э.Д.

И23

Системный анализ процессов и аппаратов химической технологии : учебное пособие / Э.Д. Иванчина, Е.С. Чернякова, Н.С. Белинская, Е.Н. Ивашкина ; Томский политехнический университет. – Томск : Изд-во Томского политехнического университета, 2017. – 115 с.

ISBN 978-5-4387-0787-5

В пособии изложены методологические основы системного анализа процессов и аппаратов химической технологии. Рассмотрены принципы системного анализа процессов и аппаратов химической технологии как многоэтапной процедуры принятия решений. Изложены научные концепции проектирования новых и оптимизации действующих химических производств. Показана с позиции системного анализа взаимосвязь явлений в отдельных процессах и аппаратах химико-технологических систем. Рассмотрены пути реализации стратегии системного анализа процессов и аппаратов химической технологии посредством программной реализации математических моделей и моделей для представления знаний.

Предназначено для студентов химико-технологических специальностей и инженеров-технологов химических, нефтехимических и нефтеперерабатывающих производств.

УДК 66.02(075.8)

ББК 35.11я73

Рецензенты

Кандидат технических наук
начальник отдела технологического инжиниринга
ОАО «ТомскНИПИнефть»

Д.С. Полубоярцев

Кандидат химических наук
научный сотрудник Института химии нефти СО РАН

Е.Б. Кривцов

ISBN 978-5-4387-0787-5

© ФГАОУ ВО НИ ТПУ, 2017

© Иванчина Э.Д., Чернякова Е.С.,
Белинская Н.С., Ивашкина Е.Н., 2017

© Оформление. Издательство Томского
политехнического университета, 2017

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	6
1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ.....	7
1.1. Элемент и система	10
1.2. Иерархический принцип формирования химико-технологической системы	11
1.3. Системный анализ процесса приготовления товарных бензинов..	11
Контрольные вопросы по разделу	14
2. МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ.....	15
2.1. Химические модели. Схемы превращения реагентов.....	15
2.2. Графические модели.....	16
2.3. Знаковая (математическая) модель.....	17
Контрольные вопросы по разделу	18
3. СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ – СТРАТЕГИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ.....	19
3.1. Определение и систематизация информации	19
3.2. Способы представления информации о функционировании процессов и аппаратов химической технологии	19
Контрольные вопросы по разделу	21
4. СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ В РЕЖИМЕ ДИАЛОГА «ЧЕЛОВЕК–ЭВМ». ПОСТРОЕНИЕ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ РАСЧЕТА И ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ.....	22
4.1. Основные понятия и определения интеллектуальной системы	22
4.2. Основные этапы построения интеллектуальной системы	23
4.3. Модели знаний при разработке интеллектуальной системы	23
4.3.1. Логическая модель для представления знаний	23
4.3.2. Фреймовые модели для представления знаний.....	25
4.3.3. Семантическая модель для представления знаний	27
4.3.4. Продукционные модели для представления знаний.....	27
4.3.5. Фреймово-продукционная модель процесса пиролиза углеводородного сырья для представления знаний	27

4.4. Систематизация знаний процессов и аппаратов химической технологии	28
Контрольные вопросы по разделу	30
5. КОНЦЕПЦИИ СОЗДАНИЯ НОВЫХ И ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ДЕЙСТВУЮЩИХ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ	31
5.1. Концепции при проектировании и эксплуатации ХТС	31
5.2. Концепция глубины и полноты переработки сырья	31
5.3. Концепция минимизации энергетических и тепловых затрат	34
5.4. Концепция минимизации производственных отходов	36
5.5. Концепция оптимального использования процессов и аппаратов химической технологии	36
5.6. Реализация концепций системного анализа процессов и аппаратов химической технологии	39
Контрольные вопросы по разделу	43
6. ОСНОВНОЙ ПРИНЦИП СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА – ВЗАИМОСВЯЗЬ ЯВЛЕНИЙ В ПРОЦЕССАХ И АППАРАТАХ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ.....	44
6.1. Задачи анализа и синтеза процессов и аппаратов химической технологии	44
6.1.1. Анализ процессов и аппаратов химической технологии	44
6.1.2. Материальный и тепловой балансы процессов и аппаратов химической технологии	45
6.2. Стратегия синтеза математического описания процессов и аппаратов химической технологии	48
6.2.1. Моделирование кинетики гомогенных и гетерогенных реакций	48
6.2.2. Иерархическая структура математического описания процессов и аппаратов химической технологии.....	49
6.2.3. Элементарные акты химического превращения вещества в процессах и аппаратах химических производств	50
6.2.4. Взаимосвязь явлений в процессах энергомассопереноса.....	51
6.2.5. Определение значений кинетических параметров при математическом моделировании процессов и аппаратов химической технологии	53
6.2.6. Решение обратной кинетической задачи	54
6.2.7. Составление регулирующего алгоритма.....	54
6.2.8. Расчет параметров регуляризации	55
Контрольные вопросы по разделу	55

7. СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПО ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМ, ЭКОНОМИЧЕСКИМ И ЭКОЛОГИЧЕСКИМ КРИТЕРИЯМ	57
7.1. Постановка задачи оптимизации процессов и аппаратов химической технологии	57
7.2. Основные этапы системного анализа процессов и аппаратов химической технологии	57
7.3. Критерии для системного анализа процессов и аппаратов химической технологии	60
7.3.1. Классификация критериев оптимизации	60
7.4. Мультиобъектный анализ химических производств	62
7.4.1. Задачи анализа процессов и аппаратов химической технологии	63
7.5. Компромиссное решение при оптимизации процессов и аппаратов химической технологии	63
7.6. Методы решения задач многокритериального анализа.....	66
7.7. Процесс компаундирования товарных бензинов.....	68
7.8. Решение задач многоцелевой оптимизации (Парето-оптимизация)	71
7.9. Описание алгоритма оптимизации процесса компаундирования ..	72
7.10. Календарное планирование производства бензинов на основе планов Aspen Pims	75
Контрольные вопросы по разделу	79
8. СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ ТОПЛИВА И ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ	80
9. ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ	82
Лабораторная работа № 1. Системный анализ процесса компаундирования товарных бензинов	82
Лабораторная работа № 2. Модульный принцип расчета ХТС	89
Лабораторная работа № 3. Построение интеллектуальной системы для диагностики причин отклонений в работе промышленной установки	104
Лабораторная работа № 4. Идентификация значений кинетических параметров при математическом моделировании химических превращений	108
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	113
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	114

ВВЕДЕНИЕ

В процессе разработки пособия использована стратегия системного анализа. Системный анализ есть результат применения к исследованию опыта изучения, создания и эксплуатации химико-технологической системы [1, 2]. Можно выделить основные этапы:

1. Выделяются параметры и элементы, которые определяют необходимые свойства процессов и аппаратов химической технологии.

2. Устанавливаются зависимости выходных параметров процессов и аппаратов химической технологии от входных.

3. Проводится исследование процессов и аппаратов химической технологии, то есть рассчитываются показатели, определяются свойства (особенности), изучается эволюция (развития, изменения) производственной системы для повышения эффективности ее функционирования. Большое значение при этом имеет накопленный опыт эксплуатации в виде данных и знаний.

Описание системы процессов и аппаратов химической технологии, зависящей от множества параметров – сложная совокупность функциональных зависимостей. Система является интеллектуальной, т. к. она базируется на фактических данных по эксплуатации промышленных процессов и аппаратов химической технологии. Эти данные анализируются, делаются выводы и даются рекомендации. Физико-химическая модель – это программно реализованный главный блок этой системы, включающий расчеты по уравнениям материальных и тепловых балансов превращения углеводородов на поверхности катализатора, а также кинетические модели дезактивации вследствие процессов отравления, старения, блокировки активной реакционной поверхности коксом.

Единой методической основой написания данного пособия явилась стратегия системного анализа. Она применена для расчета, анализа и прогнозирования процессов и аппаратов химической технологии.

1. ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Предметом изучения являются системы различной природы. **Методом исследования** является метод математического моделирования, который использует **стратегию системного анализа процессов и аппаратов химической технологии**.

Основным инструментом в системном анализе **процессов и аппаратов химической технологии** является компьютер.

Системный анализ **процессов и аппаратов химической технологии** выполняется изучением системы, способной воспринимать, хранить и перерабатывать информацию. Для восприятия информации используются специальные приборы – датчики. Для хранения – всевозможные носители информации – диски, дискеты.

Для переработки информации используется метод математического моделирования, компьютерные методы и программы обеспечения.

Химико-технологическая система (ХТС) – это совокупность физико-химических процессов, происходящих в системе, а также средств для их реализации.

Основные **задачи**, которые позволяет решить системный анализ **процессов и аппаратов химической технологии**:

1. Компьютерный анализ эффективности функционирования каждого аппарата производства и всей системы в целом.
2. Синтез ресурсоэффективной системы процессов и аппаратов.
3. Оптимизация **процессов и аппаратов химической технологии** по технологическим, экономическим и экологическим критериям.
4. Диагностика отказов в работе **процессов и аппаратов химической технологии** и выдачи рекомендаций для их устранения.
5. Объективное тестирование существующих **процессов и аппаратов химической технологии** технологий и выдачи рекомендаций для реконструкции в данный момент существующего производства.
6. Мониторинг и прогнозирование производства.

Любая система **процессов и аппаратов химической технологии** взаимодействует с внешней средой и характеризуется входными и выходными параметрами.

Компонентами входных параметров является химический состав сырья, его расход, а также технологические условия проведения процесса. Выходными параметрами являются показатели качества продукта и общее количество производимой продукции.

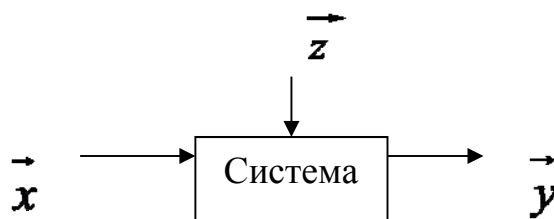


Рис. 1. Параметры системы:

\vec{x} – входные; \vec{y} – выходные; \vec{z} – вектор управления

Реактор является элементом системы.

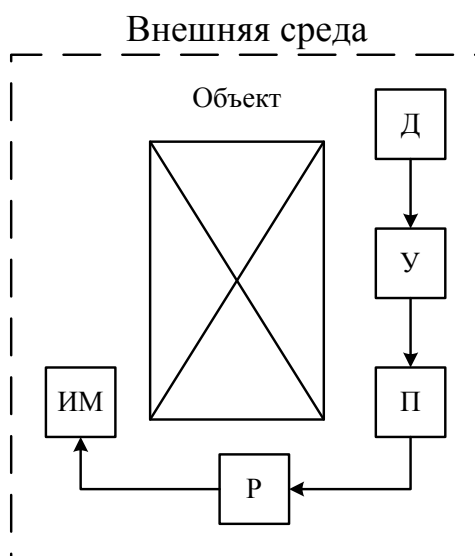


Рис. 2. Схема воздействия управляющих параметров на систему:

Д – система датчика; У – усилитель, П – преобразователь; Р – регулятор; ИМ – исполнительный механизм

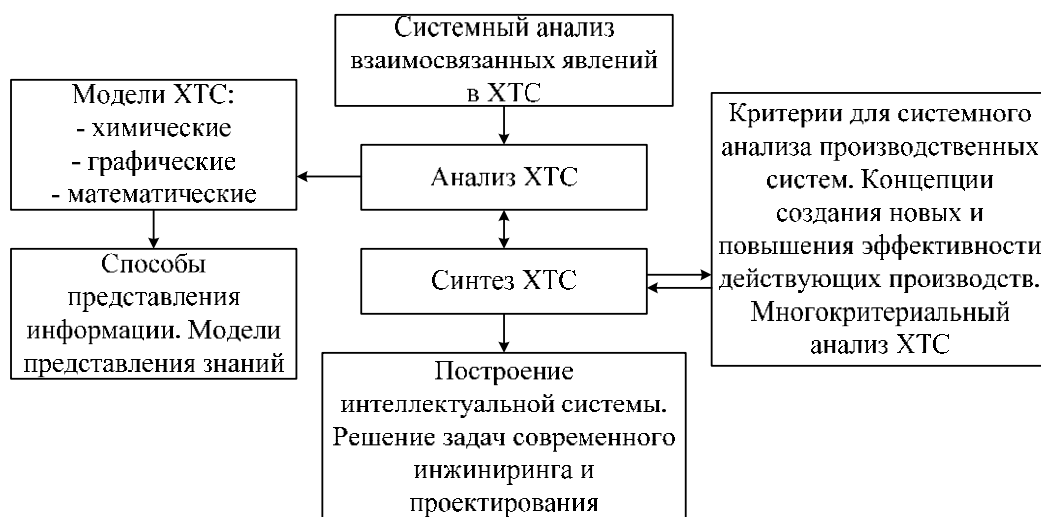


Рис. 3. Системный анализ – стратегия для изучения химико-технологической системы

Системный анализ – обобщение и систематизация знаний в теории и практике химических производств.

Описание системы, состоящей из сотен элементов и связей из систем алгебраических или дифференциальных уравнений, основное средство системного анализа – ЭВМ.

Эвристические решения – накопленный опыт исследования химического производства.

При моделировании химико-технологических процессов применяется системный подход, в соответствии с которым процессы и аппараты химической технологии рассматриваются как некоторая функциональная система.

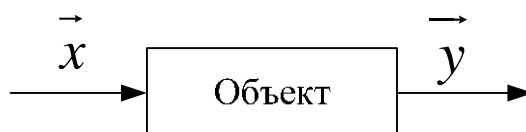


Рис. 4. Параметры системы:

\vec{x} – входные; \vec{y} – выходные

Системный подход к оптимизации процессов и аппаратов химической технологии дает возможность осуществить моделирование процессов и аппаратов и их совокупности (химическое производство).

На рис. 5 представлена химико-технологическая система получения целевого продукта Р из сырья с компонентами А и В. Рецикл по непревращенным компонентам сырья увеличивает его степень превращения.

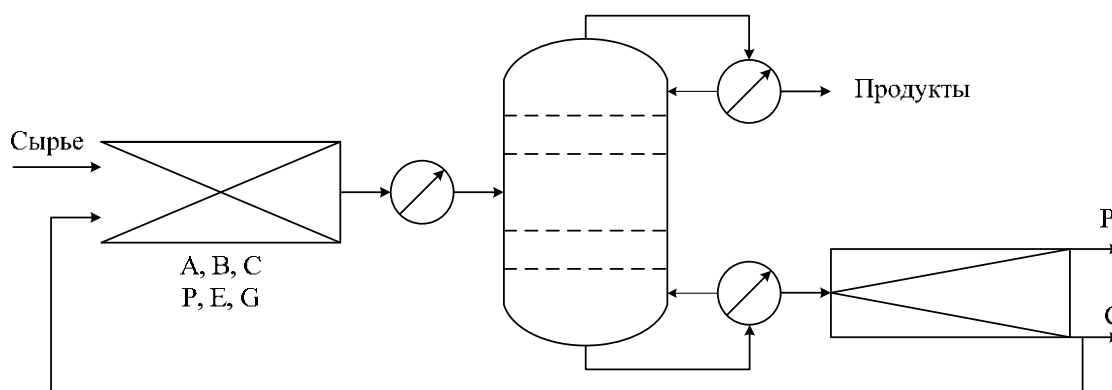


Рис. 5. Технологическая схема превращения целевого продукта Р

Целевой продукт Р образует с компонентом Е азеотропную смесь максимальной температурой кипения, часть его попадает в куб ректификационной колонны. Чтобы снизить потери целевого продукта Р, необходимо организовать рецикл.

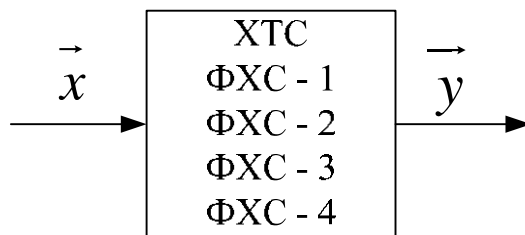
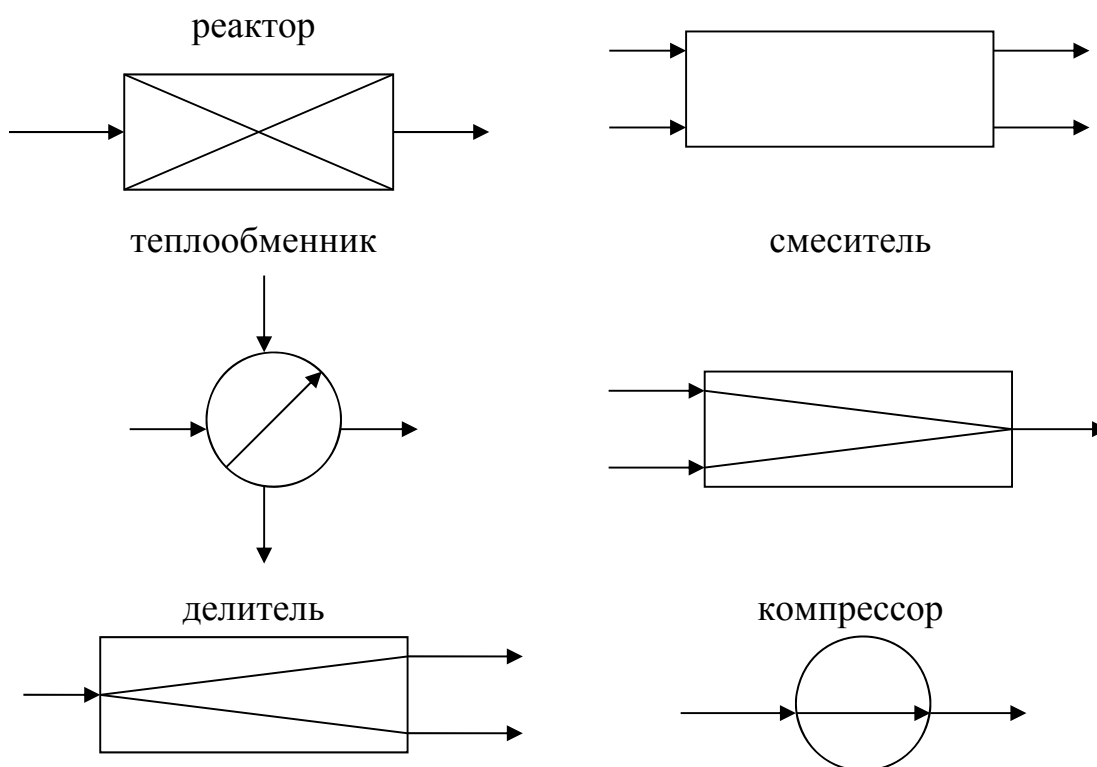


Рис. 6. Взаимодействие подсистем в процессе преобразования сырья \vec{x} в продукт \vec{y}

1.1. Элемент и система

Понятия системы и элемента являются относительными. Система может быть элементом другой системы более крупного масштаба. Элементы систем могут быть разделены на части. Реакторный узел – система по отношению к одному реактору. Но одновременно реакторный блок является реакционным элементом по отношению к химико-технологической системе. Рассмотрим условное обозначение элементов ХТС, которые она включает:



Большим системам, в отличие от малых, присуща определенная целостность, наличие общих целей и назначений. Примером больших систем может быть цех или завод.

1.2. Иерархический принцип формирования химико-технологической системы

Иерархия процессов и аппаратов химической технологии – многоуровневая структура.

Таблица 1

Иерархическая структура процессов и аппаратов химической технологии

Уровень иерархии	Типовой пример	Назначение
5. Отрасль химической промышленности	Совокупность заводов химической промышленности данного округа	Получение и распределение продукции по назначению
4. Технологическая линия	Совокупность заводов, связанных между собой общей производственной линией; первичная подготовка нефти, АВТ, пиролиз бензина, полимеризация	Объединение заводов по сырью и продукции
3. Химический завод	Совокупность цехов, объединенных общим сырьем (завод производства метанола)	Объединение технологических цехов по выпуску продукции
2. Цех	Совокупность отделений, работающих на выпуск определенной продукции (цех производства бензина)	Объединение типовых процессов
1. Типовой процесс	Реактор, колонна, теплообменник, смеситель	Преобразование вещества и энергии

1.3. Системный анализ процесса приготовления товарных бензинов

Октановое число – это показатель детонационных свойств моторного топлива. Смесевые бензины сравниваются со смесью изооктана (условно принятого за 100 единиц) и нормального гептана (принятого за 0). Если октановое число смесевых бензинов равно 92, то это означает, что он детонирует как смесь 92 % изооктана и 8 % гептана. Октановое число бензина после первичной перегонки нефти обычно не превышает 60–70.

Октановое число потока смешения и в целом смеси рассчитывается по правилу аддитивности:

$$ОЧ_{см} = \sum_{i=1}^n a_i \cdot ОЧ'_i, \quad (1)$$

где $ОЧ'_i$ – октановое число i -го потока; a_i – доля потока в смеси; n – количество потоков;

$$OЧ' = \sum_{i=1}^k C_i \cdot OЧ_i, \quad (2)$$

где $OЧ_i$ – октановое число углеводорода; C_i – концентрация углеводородов, мас. доли; k – количество углеводородов в потоке.

Таким образом, при известных концентрациях и октановых числах каждого компонента в потоке (табл. 1), можно рассчитать октановое число потока. Также можно рассчитать октановое число смеси бензина при компаундировании двух потоков, зная, в каком соотношении они смешиваются.

Кроме этого также имеется возможность и решения обратной задачи. Задаваясь октановым числом смеси потоков для приготовления заданной марки товарного бензина можно рассчитать соотношение (доли), в котором необходимо смешать исходные потоки.

Таблица 2

Углеводородный состав потоков смешения, % мас.

Название	ОЧ (ИМ)	Изомеризат-	Рафинат	А-80	До С8 фракция	АИ-92	АИ-98
1	2	3	4	5	6	7	8
Пропан	100	1,7		0,4		0,1	0,0
Бутан	93,6	5,6	0,2	1,2		1,3	0,5
Пентан	61,7	20,5	2,3	13,9	5,6	5,2	1,4
Гексан	24,8	7,3	20,8	7,7	3,4	3,3	1,8
Гептан	0,00	0,0	4,5	1,9	1,9	2,7	2,9
Октан	-19,0		0,1	0,7	4,8	0,6	0,4
Нонан	-39,0			0,1		0,2	0,3
Сумма n-парафинов		35,1	27,9	26,4	15,7	13,5	7,3
И-бутан	101,00	0,8	0,0	0,4		0,5	0,1
2,2-метилбутан	92,0		3,5	1,5	0,6	0,5	0,2
2,3-метилбутан	101,7	2,8	3,6	1,6	0,8	0,5	0,3
2,2,3-метилбутан	105,8	2,5	0,1	0,0	0,0	0,1	0,0
И-пентан	92,3		2,9	14,4	3,8	6,6	4,0
2-метилпентаны	73,4	21,8	21,5	9,2	4,2	3,5	1,7
3-метилпентаны	74,5	14,3	15,7	6,6	3,2	2,5	1,3
3,3-метилпентаны	80,80	10,26	0,56	0,26	0,24	0,43	0,33
2,3-метилпентаны	91,1		2,0	0,8	0,8	1,1	1,0
2,4-метилпентаны	83,1	0,2	0,9	0,4	0,3	0,5	0,4
2,2,3-метилпентан	38,0	0,0			0,1		
2-метил, 3-этилпентан	87,3				2,0		
2,3,4-метилпентан	101,3			0,0	0,0	0,0	
2-метилгексан	42,4		3,1	2,1	2,2	2,9	2,8

3-метилгексан	52,0	0,0	5,3	2,5	2,7	3,6	3,5
2,5-метилгексан	55,5	0,0	0,0	0,2	1,5	0,2	0,1
2,4-метилгексан	65,2		0,1		1,8	0,2	0,1
2,3-метилгексан	71,3		0,0		0,2	0,2	0,1
3,4-метилгексан	76,3		0,0		0,9	0,1	0,1
2,3,5-МГ	90,0				0,0	0,0	0,0
2,2,3-триметилгексан	92,0						
2-метил, 4-этилгексан	30,0					0,0	0,0
2-метилгептан	21,7		0,1		5,6	0,6	0,4
4-метилгептан	26,7		0,1		2,7	0,3	0,2
3-метилгептан	26,8		0,2		8,4	1,0	0,7
2,2-метилгептан	66,0					0,0	0,0
2,4-метилгептан	62,0				0,2	0,0	0,1
2,6-метилгептан	33,0					0,0	0,0
2,5-метилгептан	50,0				0,0	0,1	0,1
3,3-метилгептан	33,7				0,05		
И-нонан	40,0		0,0			0,6	2,4
Сумма изоалканов		52,7	64,9	40,0	42,4	26,5	20,5
Ц-пентан	83,0	3,2	0,4		0,1	0,6	0,1
Ц-гексан	91,3	0,7	0,4			0,1	0,0
МЦ-пентан	40,0	6,2	3,3		0,5	1,8	0,8
1,3-метилциклопентан (цис)	40,0		0,1		0,1	0,1	0,1
1,3-диметилциклопентан (транс)	40,0		0,7		0,4	0,4	0,4
1,2-метилциклопентан (транс)	40,0		0,2		0,2	0,1	0,1
1,2-метилциклопентан (цис)	38,0		0,1		0,9	0,1	0,10
1,1,3-метилциклопентан	38,0		0,6		0,1	0,1	0,0
1-2-4-метилциклопентан	38,0				0,2	0,2	0,2
1,2,3-метилциклопентан	38,0				0,1	0,1	0,0
1,1,2-метилциклопентан	38,8				0,1	0,0	0,0
ЭЦ-пентан	67,2		0,1		0,8	0,2	0,1
МЦ-гексан	74,8				0,2	0,1	0,1
1,2-метилциклогексан (транс)	80,9		0,0			0,0	
1,3-метилциклогексан (транс)	66,9					0,02	
Циклоалканы до С8	50,0		0,0		0,8	0,2	0,1
Циклоалканы до С9	45,0						0,0
Сумма циклоалканов		10,3	6,2	0	4,6	4,3	2,3
Б	115,0	1,8	0,0			3,7	3,0
Т	114,0	0,0	0,4			22,1	18,4
п-К	120,0	0,0	0,1			1,7	2,4
м-К	120,0	0,0	0,1			3,7	5,7
о-К	120,0	0,0	0,1			2,5	2,5
ЭЦГ+ЭБ	114,0		0,0			2,4	2,9
Тяжелые С9+	110,0		0,2			19,1	21,1
Сумма аренов		1,90	0,90	0	0	54,97	56,04
МТБЭ	130,0					0,6	14,3
Всего углеводородов		100,0	100,00			100,00	100,4

Системный анализ процесса приготовления бензина проводится в две стадии:

1. Определяется октановое число потока (формула (1));
2. Определяется доля потока в смеси для заданного октанового числа (формула (2)).

Контрольные вопросы по разделу

1. Дайте определение понятию «системный анализ».
2. Что такое ХТС и какие основные элементы в себя включает?
3. Какие задачи позволяет решать кибернетика для производства?
4. Поясните схему воздействия управляющих параметров на химико-технологическую систему.
5. По каким принципам осуществляется декомпозиция сложной системы на более простые подсистемы?
6. Перечислите основные уровни Иерархической структуры производства и их назначение.
7. Что такое октановое число?

2. МОДЕЛИ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Любую систему процессов и аппаратов химической технологии можно описать моделью, которая дает информацию о ее функционировании.

К показателям любого аппарата относят параметры входных и выходных потоков, показатели управляющих и возмущающих воздействий, некоторые параметры состояния этого аппарата, которые определяют его функционирование в текущий момент времени.

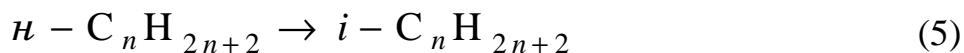
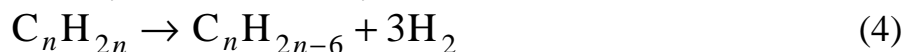
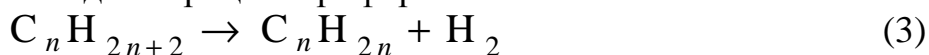
Для анализа и синтеза аппаратов, входящих в химико-технологическую систему, необходимо иметь их математическое описание или модель, которая качественно и количественно характеризует состояние химико-технологической системы.

Обобщенная модель любого производства состоит из трех основных частей: химической, графической, математической.

2.1. Химические модели. Схемы превращения реагентов

Построение схемы превращения – это химическая часть общей модели. В основе **химической модели** лежат химические реакции, которые позволяют из исходного сырья получить продукт заданного качества при определенных технологических условиях. В химическую модель включаются все основные и побочные реакции. В случае многокомпонентных процессов (нефтехимические, нефтеперерабатывающие процессы) записывают формализованную химическую модель, которая не содержит промежуточных стадий превращения компонентов.

Химическая модель процесса риформинга бензинов:



Данная химическая схема включает три реакции процесса. Для более глубокого анализа записывается более подробная химическая модель, которая включает реакцию гидрокрекинга и коксообразования.

Составление схемы превращения дает возможность выполнять анализ различных способов преобразования сырья в продукт, а также выбрать наилучшую технологию производства.

Химическая модель позволяет также выбрать оптимальное оборудование процесса. Например, из приведенной химической модели процесса риформинга бензинов следует, что реакции превращения алкановых или циклоалкановых углеводородов являются эндотермическими.

Следовательно, температура процесса уменьшаться, поэтому для поддержания оптимального режима необходимо проводить процесс с возможностью промежуточного подогрева. Поэтому промышленные установки производства бензинов включают трех- и пятиреакторные схемы с промежуточными секционными печными блоками.

Таким образом, химические модели используются как при разработке и проектировании промышленных процессов, так и при их эксплуатации.

2.2. Графические модели

Графические модели могут быть представлены функциональной, технологической, структурной схемами.

Функциональная схема показывает технологическую связь между процессами и аппаратами.

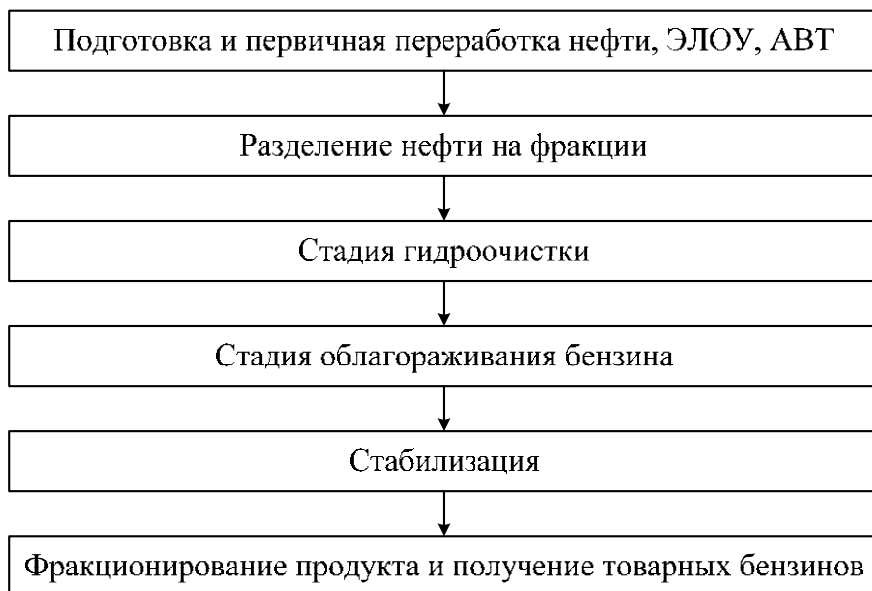


Рис. 7. Функциональная схема производства бензинов

Технологические схемы производств показывают аппараты и способы их соединения, а также последовательность протекания процессов.

В узлы смешения 1 подаются бензиновые фракции нефтей 85...180 °С, которые смешиваются с водородсодержащим газом и нагреваются в сырьевом теплообменнике 2. Катализат направляется в колонну стабилизации 8, где также происходит выделение углеводородных газов.

Структурные схема позволяют выделить однотипные стадии процессов.

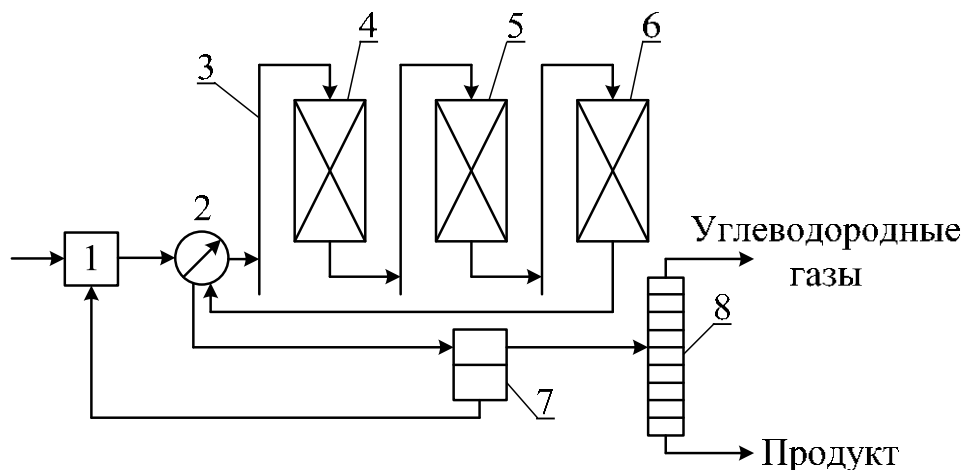


Рис. 8. Технологическая схема блока риформинга установки ЛК-6У:
1 – смеситель; 2 – теплообменник; 3 – змеевик; 4,5,6 – реакторы;
7 – сепаратор; 8 – колонна

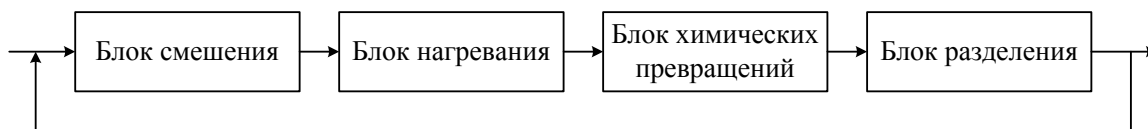


Рис. 9. Структурная схема блока риформинга

Структурная схема содержит следующие стадии: нагрев (теплообменник 2 и печи 3); стадия химического превращения – реакторы 4, 5, 6; стадия разделения – сепаратор 7 и колонна стабилизации 8.

2.3. Знаковая (математическая) модель

Математическая модель из двух уравнений:

1. Математическое описание процессов в аппарате:

$$\vec{y}_k = F_k(\vec{x}_k, \vec{z}_k, \vec{u}_k). \quad (6)$$

F_k – некоторый функционал (алгебраический, дифференциальный или интегральный).

2. Математическое описание технологических связей

$$\vec{x}_k = L_{l-k}(\vec{Y}_l), \quad (7)$$

где L_{l-k} принимает значение l в том случае, если существует технологическая связь между аппаратами под номерами l и k , а именно выходные параметры k -го аппарата являются входными параметрами в l -й аппарат. $L_{l-k} = 0$ в том случае, если связь между этими аппаратами отсутствует.

Применительно к процессу риформинга – будет существовать связь между 1-м и 2-м, между 7-м и 2-м аппаратами. Но не будет существовать связь между 4-м и 6-м.

При составлении химической модели процесса риформинга мы объединили алканы, циклоалканы и ароматические углеводороды.

Количественно адекватность оценивается по методу наименьших квадратов, и определяется среднеквадратичное отклонение рассчитанных значений характеристик от экспериментальных. А также могут быть использованы специальные критерии адекватности, например критерий Фишера.

Контрольные вопросы по разделу

1. Что собой представляет модель производства и какими параметрами она характеризуется?
2. Поясните особенности химической модели ХТС.
3. Перечислите разновидности графических моделей. В чем заключаются их особенности.
4. В чем отличие технологической и структурной схемы производства?
5. Что собой представляют математические модели ХТС?

3. СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ – СТРАТЕГИЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Основными задачами системного анализа является сбор, хранение и переработка информации.

3.1. Определение и систематизация информации

Под **информацией** понимают любые знания о процессах и аппаратах химических технологий. Информация – это сеть данных и знаний о взаимосвязанных между собой аппаратах и процессах, происходящих в них. Степень неопределенности или энтропия информации P – отношение числа удачных опытов к числу общих опытов:

$$P = \frac{n}{N}. \quad (8)$$

3.2. Способы представления информации о функционировании процессов и аппаратов химической технологии

Наиболее распространенный способ представления информации – **принцип черного ящика**.



Рис. 10. Представление информации по принципу «черного ящика»: $Y = F(X)$

Теплоемкость $C_p(T) = AT + B$, где A , B – коэффициенты, которые определяются по методу наименьших квадратов. В зависимость для теплоемкости не заложены физико-химические закономерности.

Детальный анализ процессов и аппаратов химических технологий является вторым предельным способом представления. В виду сложности данного способа невозможно определить параметры и конечный результат.

Способ **формализации физико-химических закономерностей** позволяет с некоторой погрешностью получить конечный результат. Примером формализации служат модели идеального перемешивания при допущении равенства концентраций реагентов в каждой точке реактора и модель вытеснения (L (длина) $\gg D$ (диаметр)).

Формализованный подход может быть применен в том случае, когда имеется способ оценки погрешности, который вносит формализация.

$$\bar{Y} = F(\bar{X}, \bar{Z}), \quad (9)$$

где F – некоторый функциональный оператор.

Детерминированная модель смесителя потоков:

$$G_k = \sum_{i=1}^N G_i; \quad (10)$$

$$T_k = \frac{\sum_{i=1}^N G_i \cdot C_{pi} \cdot T}{C_{pk}(T_k) \cdot G_k}. \quad (11)$$

Дифференциальные уравнения для математического описания структуры потоков в реакторе:

$$V_a \frac{dC}{d\tau} = V(C - C_0) + W, \quad (12)$$

где V_a – объем зоны идеального перемешивания; C , C_0 – текущая и исходная концентрации, соответственно; V – объемная скорость потока; W – скорость химической реакции; τ – время контакта.

Если ввести безразмерный параметр θ , то получим

$$\theta = \frac{\tau \cdot V}{V_a}; \quad (13)$$

$$C = C_0 \cdot e^{-\theta}. \quad (14)$$

Обыкновенное дифференциальное уравнение может быть записано в том случае, когда в реакторе имеем режим идеального вытеснения при отсутствии продольного или поперечного перемешивания в предположении стационарного режима:

$$\frac{dC}{d\tau} = -U \frac{dC}{dl} + W, \quad (15)$$

где W – скорость химической реакции.

В этом случае мы имеем дифференциальное уравнение, которое может быть решено методами Эйлера, Рунге–Кутты и др.

В том случае, когда необходимо учитывать продольное перемешивание, мы имеем дифференциальное уравнение в частных производных:

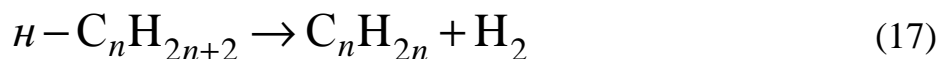
$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = -U \frac{\partial C}{\partial l} + D \frac{\partial^2 C}{\partial l^2} + W, \quad (16)$$

где D – коэффициент диффузии.

Данное уравнение отличается от предыдущего наличием члена второго порядка, который учитывает диффузию, происходящую в аппарате.

Реакция изомеризации нормального парафина в изопарафин протекает в три стадии:

1 стадия



2 стадия



3 стадия

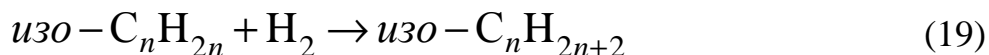


Схема превращения содержит суммарную реакцию, формализация предполагает запись брутто-реакции.

При сокращении списка компонентов, принимающих участие в реакциях, происходит объединение в реакционные серии: алканы, циклоалканы, арены.

Контрольные вопросы по разделу

1. Дайте определение информации.
2. Какие Вы знаете способы представления информации?
3. Что такое формализация физико-химических закономерностей? Приведите примеры формализации.
4. Чем определяется степень формализации?
5. Что собой представляют детерминированные математические модели?

4. СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ В РЕЖИМЕ ДИАЛОГА «ЧЕЛОВЕК–ЭВМ». ПОСТРОЕНИЕ ИНТЕЛЛЕКТУАЛЬНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ РАСЧЕТА И ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Под **интеллектуальной системой** будем понимать инструмент или совокупность программных средств, которые используются для решения конкретной производственной задачи.

4.1. Основные понятия и определения интеллектуальной системы

Интеллектуальная система – это технически организованная человеко-машинная система, представляющая собой совокупность базы данных и базы знаний о некоторой предметной области, а также пакета прикладных программ, обеспечивающих функционирование интеллектуальной системы на основе сбора, хранения и обработки различной информации.

Предметная область – совокупность процессов и аппаратов химических технологий, информация о которых накапливается в интеллектуальной системе.

Проблемная среда – совокупность задач, которые решаются с использованием интеллектуальной системы (технико-экономические показатели выбранного производства, совокупность критериев, по которым оценивается эффективность функционирования процессов и аппаратов химических технологий).

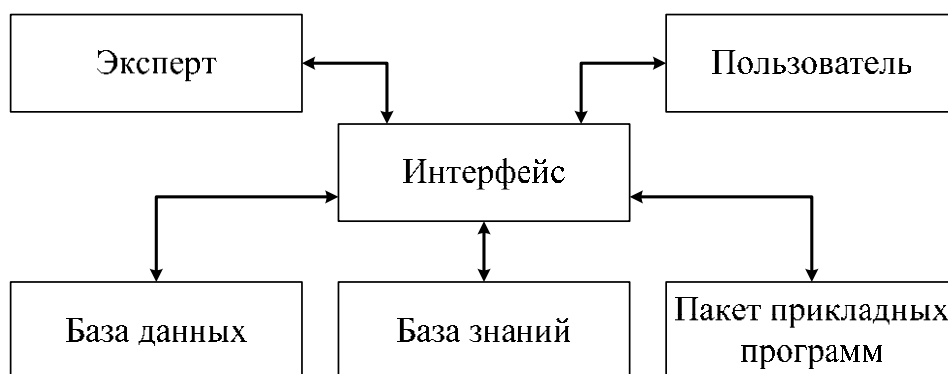


Рис. 11. Основные блоки интеллектуальной системы

Интеллектуальная система в общем случае состоит из следующих основных блоков (рис. 11):

- База данных содержит информацию или численные значения характеристик процессов и аппаратов химической технологии, которая положена в основу данного химического производства. База данных содержит кинетические, термодинамические, теплофизические параметры процессов, которые протекают в процессах и аппаратах химической технологии ХТС.
- База знаний включает информацию о функционировании процессов и аппаратов химической технологии в виде правил, заключений, рекомендаций.
- Пакет компьютерных программ включает совокупность процедур для расчета процессов и аппаратов химической технологии. Сюда входят программы, которые позволяют рассчитать типовые процессы, протекающие в химико-технологической системе.
- Интерфейс. Этот блок представляет собой объект принятия решения.

4.2. Основные этапы построения интеллектуальной системы

Этапы построения интеллектуальной системы включают последовательную разработку моделей и программ с последующим объединением их в единую систему для пользователя.

4.3. Модели знаний при разработке интеллектуальной системы

База знаний в интеллектуальной системе позволяет собирать, накапливать и обрабатывать информацию о функционировании какого-то производства. Это есть результаты обобщения работы аппаратов промышленной установки или всего производства в целом. Размер базы знаний определяет круг решаемых задач, а также длительность сбора и анализа информации.

Для использования знаний необходима формализация и организация всех знаний в некоторую систему, для того чтобы этими знаниями можно было воспользоваться. Выбор модели из числа возможных полностью определяется спецификой конкретной задачи.

4.3.1. Логическая модель для представления знаний

Логические модели задаются совокупностью множеств:

$$L = \langle T, S, A, M \rangle, \quad (20)$$

где L – логическая модель; T – множество базовых элементов; S – множество семантических и синтаксических правил, которые позволяют строить из базовых элементов T правильные синтаксические выражения или формулы; A – множество аксиом или утверждений, не подлежащие опровержению; M – множество семантических правил или правил вывода, позволяющих расширить список аксиом новыми правилами и формулами, которые после этого также становятся неопровержимыми истинами или аксиомами. Используются специальные логические знаки, отношения:

- \neg – отрицание,
- \wedge – конъюнкция (объединение),
- \leftrightarrow – эквивалентность.

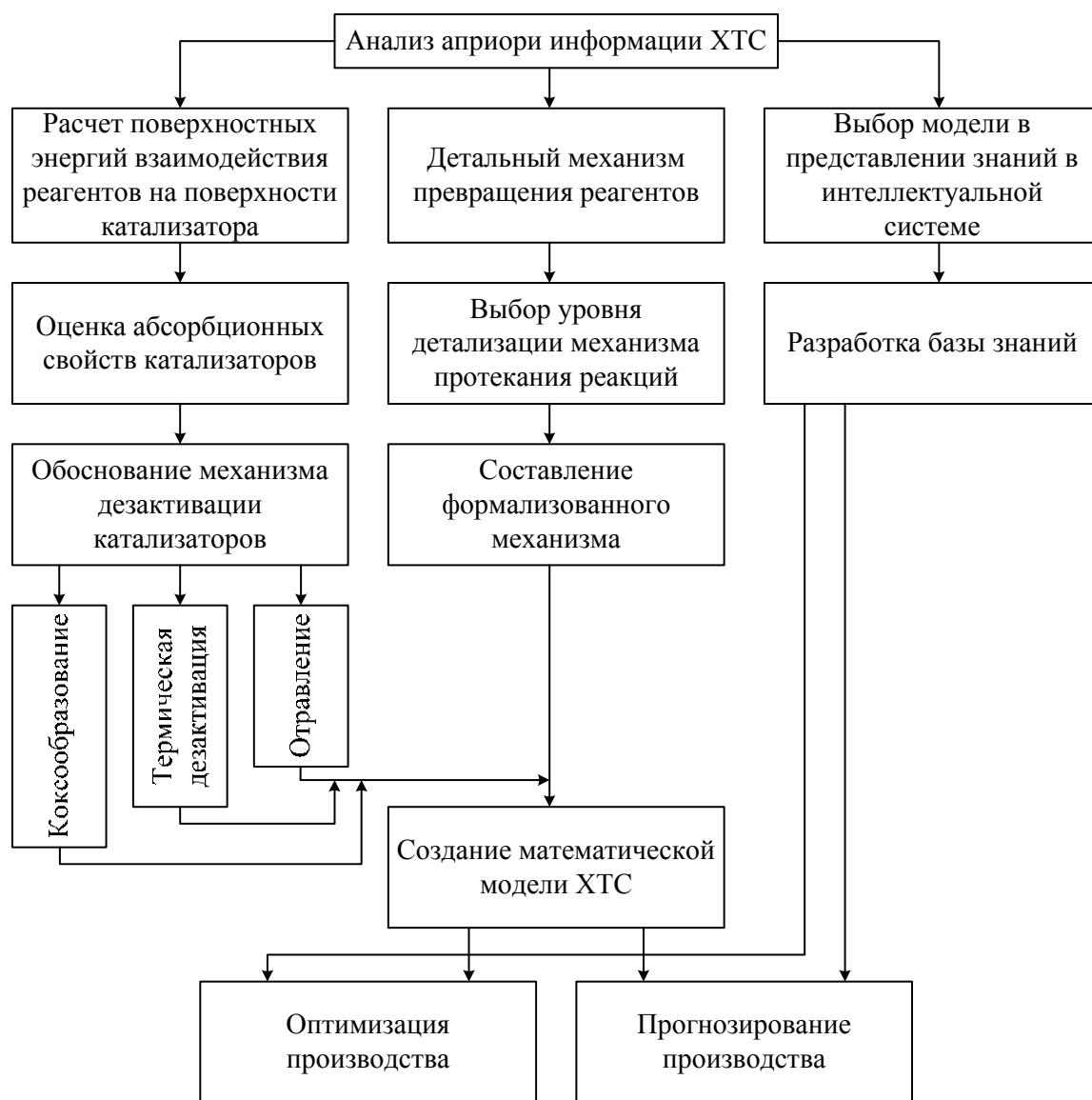


Рис. 12. Схема разработки интеллектуальной системы

Отрасль знаний, которая содержит логические операции, называется **булевой алгеброй**. Эти операции проводятся для записи в символьной форме сложных выражений. Эти операции получили название **исчисления предикатов**. Основным недостатком логических моделей является их неструктурированность.

4.3.2. Фреймовые модели для представления знаний

Структурированные модели используются в том случае, когда имеет место описание некоторой ситуации. Они также удобны для обозначения структуры и характеристики однотипных процессов и аппаратов химической технологии.



Рис. 13. Фрейм для компоновки сырья

Фреймовая модель представляет собой оболочку для описания процессов и аппаратов химических технологий. Совокупности фреймов (фрейм – это смысловое описание ситуации) описывают предметные области и представляют собой иерархические последовательности, в которых элементами фрейма являются **слоты**. Слоты объединяются в пределах одного фрейма по смысловым признакам. На верхнем уровне иерархической последовательности находится фрейм, который содержит наибольшую информацию, истинную для всех фреймов, которые находятся на низшем уровне иерархии. Фрейм – понятие вещества. При этом различные вещества отличаются друг от друга, но для каждого из веществ можно указать набор характеристик, которые его определяют. К таким характеристикам относятся: химическая формула, агрегатное состояние, цвет и др.

В этом случае фреймом является понятие вещества, а слотами, которые входят в этот фрейм, являются характеристиками, определяющими это вещество.

Фрейм имеет иерархическую структуру. В качестве предметной области рассматривается задача оптимального распределения сырья (бензиновой фракции нефти) между имеющимися объектами (промышленные процессы химической технологии – риформинг, изомеризация, гидрокрекинг и алкилирование). На более низком уровне иерархии определяются режимные условия работы промышленных процессов и аппаратов химической технологии.

Фреймовая модель представляет собой набор логических условий, которые задаются с помощью логических слов (если, то, иначе). Если фракционный состав сырья лежит в интервале 85...180 °С, то поток направляется на процесс риформинга, иначе рассматриваются другие процессы из приведенного перечня.

Программная реализация фреймовой модели – это набор условных операторов, с помощью которых находится решение. Фреймовые модели могут также передать числовую информацию, которая закладывается в характеристику определенных фреймов.

В рассмотренном примере численно определяются параметры технологического режима и характеристики сырья (температура, давление, температура закипания и др.).

Смысловая информация при составлении программы вместе с численными данными заносится в определенный файл, то есть файл с источником сырья, который должен периодически обновляться.

Фреймовая модель может быть составлена также для поиска причины отклонения режима работы. В этом случае мы имеем фреймы отклонения режима работы установки от оптимального:

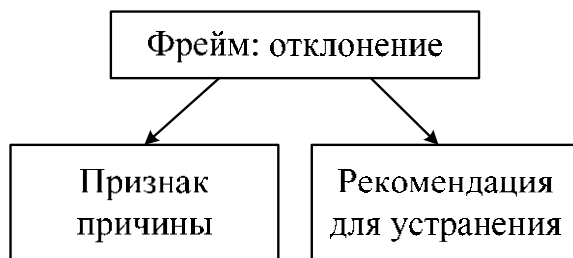


Рис. 14. Фрейм «отклонение»

В этом примере перечень отклонений от режима работы установки предполагает перечень соответствующих рекомендаций для устранения, которые являются сложными для данной ситуации.

Например, если <снижение ОЧ>, то <изменение углеводородного состава> и <повышение температуры>.

Модели для представления знаний всегда связаны с математическими моделями. В данном примере математическая модель процесса переработки углеводородного сырья позволит количественно определить, насколько поднять температуру. Но на математической модели в данном примере нельзя рассчитать причину отклонения и выдать рекомендацию.

4.3.3. Семантическая модель для представления знаний

Семантические модели для представления знаний имеют сетевую структуру и используют понятие **дерево решений**.

Ствол дерева – это проблема, которую нужно решить. А возможные варианты решения распределяются по веточкам дерева. При этом событие или предметная область является следствием другого события. Любая семантическая модель – это определенная последовательность явлений в цепочке: причина → следствие [промышленные стоки] → [загрязнение сточных вод] → [загрязнение питьевой воды]. Семантические модели наряду с фреймовыми используются для логического вывода решения в виде единой цепочки рассуждений.

4.3.4. Продукционные модели для представления знаний

Эти модели представляют собой перечень определенных правил. Например, если «условие», то «закключение». В продукционной модели в общем виде левая часть представляет всегда правило, а правая часть – действие. Продукционные модели используют в системах управления. Условия между собой в продукционной модели связываются определенными логическими знаками. Если «концентрация вещества $A < 30 \%$ » или «концентрация вещества $B > 10 \%$ », то «режим работы установки в интервале температур $T_1 < T < T_2$ ». В зависимости от состава переработанного сырья определяется температурный интервал в работе процесса и аппарата химической технологии. Численные значения температуры T можно определить только на математической модели. Сочетание математической и продукционной модели позволяет определить интервал изменения температуры в зависимости от состава сырья.

4.3.5. Фреймово-продукционная модель процесса пиролиза углеводородного сырья для представления знаний

Пиролиз относится к вторичным процессам нефтепереработки, т. е. к процессам, в которых нефть претерпевает химические изменения входящих в нее соединений. В процессе пиролиза углеводородного сырья в трубчатых

печах получают этилен, пропилен, бутилены и бутадиены одновременно с фракцией C_5+ , которая содержит тяжелые нефтепродукты, в том числе и ароматические. Мощность установок пиролиза от 60 до 1 млн тонн в год. Пиролиз – процесс высокотемпературного термического разложения.

К основным параметрам относится температура, давление, расход сырья и расход пара, который подается для снижения коксообразования в печах. Увеличением температуры и снижением расхода (время пребывания) достигаются более высокие выходы целевых продуктов.

Установка пиролиза предназначена для термического разложения углеводородов прямогонного бензина в трубчатых печах с целью получения пиролизного газа. Процесс является потенциально опасным, поэтому необходимо снабжать оператора своевременной информацией о возникновении нештатных ситуаций на установке на ранних этапах их развития, а также получать рекомендации для корректировки технологического режима установки пиролиза с целью устранения этих нештатных ситуаций.

Диагностика причин возникновения нештатных ситуаций. Выявление нештатной ситуации и идентификация вызывающей ее причины выполняется с помощью диагностической модели, связывающей причину с диагностическими показаниями, которые характеризуют нештатную ситуацию.

Рассмотрим комбинированную фреймо-продукционную модель, построенную на базе экспертной информации.

Модель представляет собой двухуровневую структуру с сетью из корневых фреймов FrRi, на верхнем уровне с ними связаны дочерние фреймы или слоты FrS, каждый из которых описывает j -ю нештатную ситуацию. Эти нештатные ситуации вызываются различного рода нарушением, которые могут возникать при эксплуатации промышленной установки, а также изменением химического состава сырья (режим работы колонны стабилизации, наличие примесей и т. д.).

4.4. Систематизация знаний процессов и аппаратов химической технологии

Для систематизации знаний о процессе каталитического риформинга бензинов на основании кинетических и технологических закономерностей протекания процесса, особенностей его промышленного оформления и целевого назначения выявлена многоуровневая иерархическая структура (рис. 7). Вертикальные связи данной структуры являются основой для рассмотрения типового процесса нефтепереработки. Верхний уровень связей характеризует целевое назначение процесса и является базовым для дальнейшего описания.

Промышленная реализация каталитических процессов неоднозначна. На базе типовых процессов функционируют установки, различающиеся по назначению, мощности и аппаратному оформлению. В зависимости от типа установки предъявляются требования к сырью, и задаются регламентные значения технологических параметров. Фактически, второй уровень связей определяет ограничение на изменение технологических параметров ведения процесса и требования к фракционному составу сырья. Фрагмент знаний этого уровня для каталитического риформинга бензинов, объединяющий регламентные значения для входных температур, давления в системе, загрузки катализатора, объемного расхода сырья и циркуляции газа, оформлен в виде информационной таблицы, содержащей массивы граничных значений параметров для типовых установок.

Таблица 3

Систематизация знаний о промышленном процессе каталитического риформинга

Процесс	КАТАЛИТИЧЕСКИЙ РИФОРМИНГ БЕНЗИНОВ	
Назначение Процесса	Получение товарных бензинов	Получение индивидуальных аренов
Типы промышленных установок	1. Л-35-5 2. Л-35-11 3. ЛГ-35-11Б; ЛГ-35-11Г 4. ЛГ-35-11/600 5. ЛЧ-35-11/600 6. Л-35-11/600 7. Л-35-11/1000	1. Л-35-6 2. Л-35-12/200 3. Л-35-12/200 А 4. Л-35-8/200 Б 5. ЛГ-35-8/200 Б 6. Л-35-13/200 А 7. Л-35-13/200 Я
Характеристика сырья	Фракционный состав и плотность сырья	
	1. Групповой состав. 2. Состав по углеводородам	
Диагностика	Причины отклонения в работе промышленных установок	
Активность катализатора	1. Число регенераций. 2. Срок последней регенерации. 3. Содержание кокса на катализаторе. 4. Сбалансированность кислотных и металлических центров	
Условия переработки сырья	1. Температура. 2. Давление. 3. Скорость подачи сырья. 4. Кратность циркуляции ВСГ. 5. технологическая схема переработки сырья	
Товарные продукты	Низкооктановые бензины Высокооктановые бензины	1. Бензол и толуол. 2. Толуол и индивидуальные ксилолы

Контрольные вопросы по разделу

1. Что понимается под интеллектуальной системой?
2. Что такое предметная область и проблемная среда?
3. Перечислите основные блоки, из которых в общем случае состоит интеллектуальная система.
4. Каковы основные этапы построения интеллектуальной системы?
5. Какие Вы знаете модели для представления знаний при разработке интеллектуальной системы?
6. Приведите общую характеристику логической модели.
7. В чем отличие фреймовой и продукционной модели?
8. Приведите общую характеристику семантической модели.
9. Основные этапы систематизации знаний типового технологического процесса.
10. В чем заключается процедура вывода решений при диагностике причин отклонений в работе промышленных установок?

5. КОНЦЕПЦИИ СОЗДАНИЯ НОВЫХ И ПОВЫШЕНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ДЕЙСТВУЮЩИХ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

При проектировании химико-технологической системы необходимо выполнять ряд правил для создания оптимальной системы. Эти правила сформулированы в определенных концепциях, которые дают рекомендации разработчику новых производств.

5.1. Концепции при проектировании и эксплуатации ХТС

С помощью концепций формулируется предпроектный вариант производства. Этот вариант затем подвергается исследованию с использованием стратегии системного анализа и метода математического моделирования. Это выполняется последовательным решением задач анализа и синтеза химико-технологической системы.

Концепции создания производственных систем могут быть использованы также при управлении действующими объектами с целью создания оптимальных условий функционирования.

С помощью концепций формулируется ряд возможных вариантов химико-технологических систем, которые называются **эвристиками**. Основная задача метода математического моделирования – из всех эвристик выбрать наилучшую.

5.2. Концепция глубины и полноты переработки сырья

Рассмотрим концепцию глубины переработки сырья в продукт.

Эта концепция означает требование максимально возможного выхода целевого продукта.

Рассмотрим основные пути реализации этой концепции или практические варианты достижения максимальной глубины переработки сырья в продукты.

Известно, что технология получения товарных бензинов из нефти представляет собой совокупность химико-технологических процессов (ХТП), в результате которых повышается детонационная стойкость бензинов или октановое число. Это может быть выполнено одним из трех способов: ароматизацией сырья, изомеризацией парафинов в изоалканы и гидрокрекингом низко октановых парафинов.

Каждый из этих способов позволяет получить максимальный выход при оптимальном подборе сырья в каждом варианте. Использование

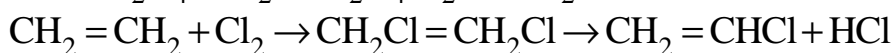
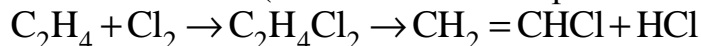
каждого из перечисленных способов для бензиновой фракции нефти обеспечивает наибольшую глубину переработки сырья.

Таким образом, выбор процесса является самым важным способом увеличения глубины переработки сырья.

Рассмотрим пример увеличения глубины переработки сырья *оптимальным выбором процесса*.

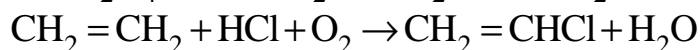
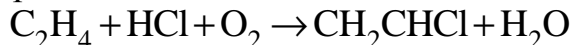
Известно, что хлорвинил $\text{CH}_2 = \text{CHCl}$ получается хлорированием этилена. Существует два промышленных способа получения хлорвинила:

1. Хлорирование этилена (каталитический крекинг 500°C)



При этом выход составляет 85...90 %.

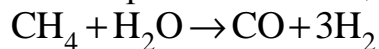
2. Гидрохлорирование этилена



Увеличение глубины переработки сырья достигается выбором процесса получения хлорвинила из этилена.

Следующим способом увеличения глубины переработки сырья является *выбор оптимального соотношения компонентов*.

Рассмотрим реакцию конверсии метана водяным паром



По стехиометрическому соотношению метана и водяного пара 1:1 равновесная степень превращения составляет 48 % при температуре 900°C и давлении 3,0 МПа. Если взять дешевый и доступный водяной пар $\text{H}_2\text{O}:\text{CH}_4 = 4:1$, то при тех же самых условиях степень превращения конверсии метана водяным паром составит 94 %.

Увеличение глубины переработки сырья возможно *заданием направления потока*.

В колонне ректификации противоточный контакт фаз обеспечивает максимальную силу процесса, так как за счет противотока более интенсивно протекает процесс массообмена.

Увеличение глубины переработки сырья может быть достигнуто также введением рецикла по непревращенным компонентам.

Рассмотрим пример.

Изменение направления потока н-пентана на выходе из реактора после выделения i-пентана позволяет увеличить выход продукта. Для изменения направления потока в данном случае используется рецикл по непревращенному сырью.

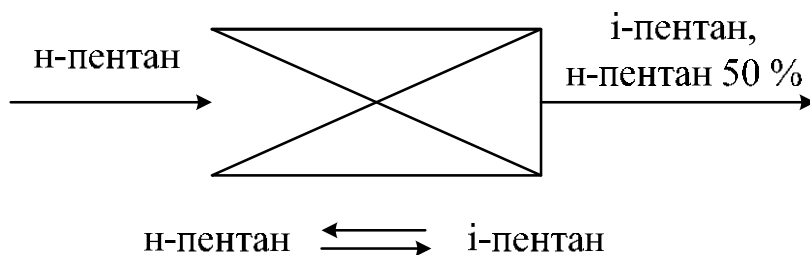


Рис. 15. Схема движения потоков без рецикла

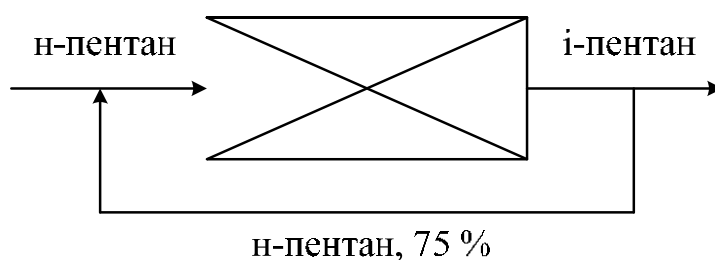


Рис. 16. Схема движения потоков с использованием рецикла

Рассмотрим концепцию полноты переработки сырья и вспомогательных материалов.

Данная концепция содержит требования максимальной степени превращения сырья в продукт, включая использование промежуточных продуктов. Если целевой продукт один, то концепция глубины и полноты совпадает. Количественным выражением данной концепции является общая степень превращения сырья. Данная концепция может быть реализована двумя способами: выбором процесса и утилизацией отходов.

В первом случае процессы выбираются таким образом, чтобы побочные продукты одного процесса являлись сырьем для другого. Например, на нефтеперерабатывающих заводах технологическая линия содержит установки гидрокрекинга и риформинга нефти в бензин, так как побочный продукт риформинга – водородсодержащий газ (ВСТ) – является одним из потоков сырья на установку гидрокрекинга.

Таким образом, сочетанием процессов увеличивается полнота переработки нефти в бензин.

Выбор процессов является наиболее принципиальным путем решения. Если вернуться в производство хлорвинила, то двухстадийная схема имеет один существенный недостаток: высокий выход HCl и, как следствие, низкая степень использования хлора.

Известно также, что наиболее эффективным способом производства этилена является гомогенный пиролиз. Использование данного процесса позволяет получить сырье для производства хлорвинила.

Если изменить условия пиролиза, то наряду с этиленом можно получить ацетилен. В этом случае выделяемый в процессе хлорирования этилена HCl можно также использовать для получения хлорвинила, направив его на гидрохлорирование ацетилена. Функциональная схема этого производства показана на рис. 17.

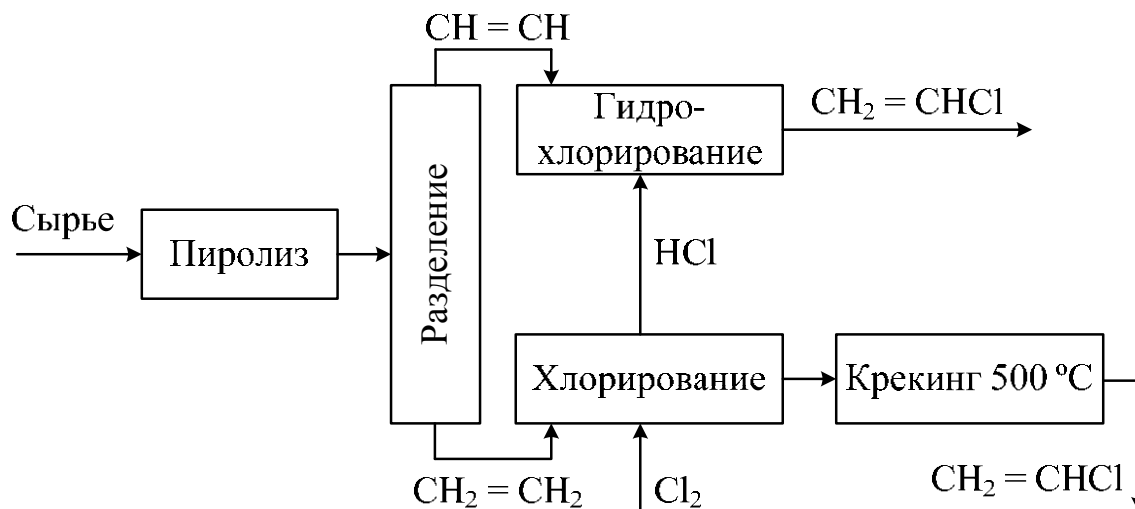


Рис. 17. Функциональная схема производства хлорвинила CH_2CHCl

Данная схема обеспечивает полноту переработки нефтяного сырья, а также хлора за счет параллельного использования побочного продукта двухстадийной схемы HCl .

Частным случаем выбора процесса является способ утилизации отходов.

Этот способ дает возможность получать полезные продукты из отходов, при этом выход целевого продукта не изменяется. Однако увеличивается полнота переработки сырья за счет переработки отходов.

5.3. Концепция минимизации энергетических и тепловых затрат

Различают три пути для реализации данной концепции (рис. 18).

Глубина переработки нефти в России за последние 30 лет практически не повышалась и составляет в среднем 65 %. Остальные 35 % в виде котельных топлив являются отходами, при сжигании которых в воздух выбрасывается огромное количество токсичных оксидов серы и азота. В условиях реально наступающего дефицита нефти и возрастающих сложностей по ее добычи, а также при наличии в достаточном количестве газового топлива существующая технология переработки

нефти является нерациональной. Нефть должна полностью перерабатываться с получением высококачественных и экологически чистых продуктов.



Рис. 18. Минимизация отходов

Установлено, что если уровень загрязнения атмосферы при сжигании угля принять за 1, то сжигание мазута дает 0,6, а природного газа – 0,2. Поэтому концепция утилизации отходов, в нашем случае отходами являются оксиды серы и азота, указывает на необходимость изменения структуры топливного баланса за счет увеличения использования природного газа. С этой целью может быть использована ресурсосберегающая технология переработки гудрона с получением следующих продуктов:

1. Широкая масляная фракция 350...500 °С – сырье для каталитического крекинга и гидрокрекинга.
2. Соляровый дистиллят как топливо для сельскохозяйственной техники.
3. Утяжеленный остаток гудрона, используемый для производства битумов.

Путь регенерации тепла реализуется в том случае, когда подогретый продуктивный поток отдает свое тепло сырьевому потоку. Одним из примеров может служить схема производства бензинов методом каталитического риформинга, когда газопродуктовый поток из реактора направляется в сырьевой теплообменник и является теплоносителем, а сырьевой поток является хладагентом.

Путь регенерации энергии. Этот способ используется в тех случаях, когда производство содержит процессы под давлением. В этом варианте регенерации энергии сжатые газы направляются на турбину, которая может привести в действие генератор.

В частном случае, это энергия сжатых газов может быть использована для работы компрессора, который, например, закачивает водород, содержащийся газ в реакторы, в которых осуществляется процесс каталитического риформинга.

Путь утилизации тепла. В этом случае тепло потоков используется для получения пара в котле-утилизаторе, который потом направляется в общезаводскую сеть и используется для различных целей.

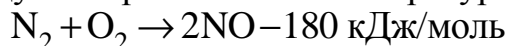
5.4. Концепция минимизации производственных отходов

Данная концепция является основой для создания безотходных производств. Практическая реализация этой концепции связана с двумя предыдущими концепциями, поэтому рассмотренные способы применимы для реализации этой концепции. Существуют также специфические способы такие, как очистка и обезвреживание отходов.

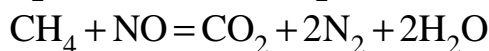
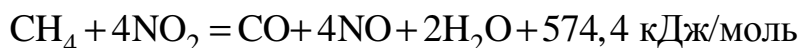
Концепция минимизации отходов направлена на защиту окружающей среды. Реализация этой концепции связана с улучшением использования сырьевых и энергетических ресурсов (что также рассмотрено в других концепциях), а также включает в себя следующие специальные мероприятия:

1. Обезвреживание выбросов.
2. Уменьшение и замена вспомогательных потоков.
3. Замкнутый водоворот.
4. Каталитическая переработка отходов.

Так, например, при производстве азотной кислоты и при сжигании топлива в топках технологических печей имеет место выброс оксида азота. Образование оксидов азота в топках происходит в результате окисления азота воздухом при высоких температурах:



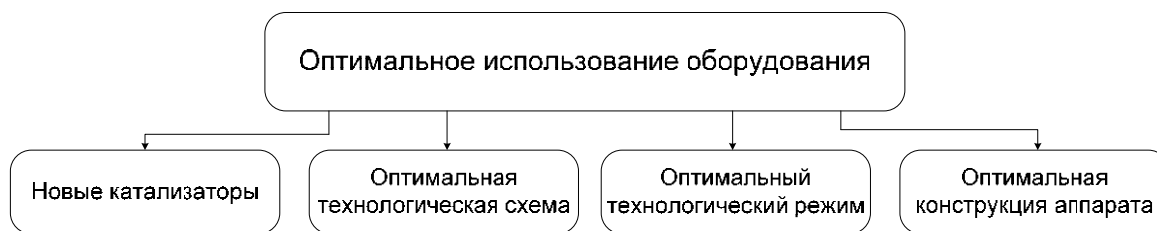
Концентрация образовавшихся продуктов (NO_x) зависит от температуры и избытка воздуха в зоне горения. Использование рецикла восстанавливает NO_x природным газом:



В качестве катализатора применяются металлы типа Pt, Pd, Ni, Cu, Cr, Fe и их сплавы. В качестве восстановителя может быть использован водород.

5.5. Концепция оптимального использования процессов и аппаратов химической технологии

При реализации данной концепции уменьшаются затраты на ведение процесса и увеличивается его интенсивность.



Путь использования новых катализаторов в процессе. На разработку новых катализаторов и их внедрение требуются большие материальные затраты. В зависимости от специфики технологии до 90 % средств при разработке нового процесса идет на катализатор, поэтому очень важный путь – это разработка наиболее эффективных каталитических систем с целью интенсификации процесса.

Разработка новых катализаторов химических процессов проводится в направлении увеличения выхода целевого продукта и повышения его качества. Требуется решать задачу выбора наиболее подходящего катализатора для данного типа сырья. Например, катализаторами каталитического риформинга бензинов являются платина и рений (Pt и Re). Соотношение платины и рения колеблется в интервале от 0,5 до 1,5 %.

Сырье каталитического риформинга – это прямогонные бензины с октановым числом 40–50 пунктов. Сырье содержит в основном парафиновые и нафтеновые углеводороды, причем их соотношение также колеблется в зависимости от нефтяного месторождения. Это соотношение может составлять то 1 до 2 (отношение парафинов к нафтенам). Выбор катализатора для конкретного перерабатывающего завода зависит от сырья.

Если сырье нафтеновое, то предпочтительнее использовать катализаторы, сбалансированные по платине и рению, то есть в которых соотношение Pt:Re составляет 1. В случае использования парафинистого сырья желательно применение несбалансированных по рению катализаторов, в которых соотношение Pt:Re составляет 0,5. Это обусловлено физико-химическими закономерностями процесса превращения углеводородов бензиновой фракции на поверхности катализатора. Избыток рения в катализаторе определяет одну из побочных реакций процесса (гидрогенолиз нафтен). При этом образуются легкие углеводороды и, соответственно, снижается выход целевого продукта – высокооктанового бензина.

Путь оптимизации технологических режимов ведения процесса. На современном уровне производства данный путь эффективно реализуется с использованием метода математического моделирования и компьютерных программ.

С использованием физико-химических моделей можно быстро определить оптимальный режим ведения процесса для конкретных

условий, а именно с учетом специфики сырья и оборудования конкретного производства.

Оптимизация режимов позволяет также определить наилучшие способы эксплуатации производства. Оптимальные режимы определяются для каждого аппарата в отдельности и всей системы в целом.

Путь оптимизации технологических схем химических производств. В этом случае определяется оптимальная топология химико-технологической системы исходя из максимальной эффективности. При оптимизации технологических схем определяются оптимальные значения структурных параметров ХТС или связи между аппаратами. Например, организация технологической схемы с рециклом по непревращенному сырью. В этом случае изменение направления потока повышает степень превращения сырья в продукт.

Задача оптимизации химико-технологической системы – это поиск экстремума, так как увеличение эффективности часто приводит к повышению затрат на производство. Например, технологическая схема с рециклом приводит к повышению затрат на организацию этого рецикла.

Поэтому для оптимального использования оборудования в этом случае необходимо определить то количество рециркулята, использование которого не приведет к существенным энергетическим затратам. При реализации данного пути приходится также решать задачу выбора типа оптимального оборудования. Например, газожидкостный процесс может быть реализован в реакторе и в насадочной колонне. Скорость массопередачи в двухфазном потоке зависит от диффузионного сопротивления фаз, количественным выражением которого является коэффициент массопередачи. По значению этого коэффициента, который определяется необходимыми условиями процесса, выбирается тип аппарата. Если имеет место быстрая реакция, то необходимо более интенсивное проведение процесса и используется реактор трубчатого типа, в который подается газожидкостный поток.

Рассмотрим еще один путь для реализации данной концепции.

Путь уменьшения материалоемкости процесса. Если принять, что производительность аппарата пропорциональна его объему $P \sim l^3$, а затраты на производство пропорциональны площади поверхности $Z \sim l^2$, то можно легко оценить, что увеличение мощности аппарата в два раза приводит к уменьшению удельных затрат на его производство на 15–20 %.

Таким образом, оптимальный выбор размера аппарата приводит к снижению удельной материалоемкости. Поэтому создание крупных производств всегда более выгодно, чем строительство малотоннажных установок. Необходимо учитывать при этом расходы на транспорт сырья и продуктов. Поэтому наряду с крупнотоннажными производствами

переработки нефти до 27 млн т в год ведется строительство модульных установок мощностью 100...200 тыс. т в год.



Рис. 19. Общая схема концепций химического анализа производств и путей их реализации

При разработке новых и оптимизации действующих производств рассмотренные концепции являются основой в стратегии проведения исследований.

5.6. Реализация концепций системного анализа процессов и аппаратов химической технологии

Практическая реализация концепций создания выгодно-эффективных производств наглядно можно рассмотреть на примере процессов и реакторов в химико-технологических системах подготовки и переработки нефти.

Химическая переработка нефти из всей обширной гаммы органических производств выбрана как модель получения многих продуктов из сложной природной смеси. Характерными признаками этой модели является многообразие схем разделения и химического превращения сложной смеси.

Нефть – темная маслянистая жидкость, в состав которой входят углеводороды и минеральные примеси.

Углеводородная часть состоит из соединений парафинового, нафтенного и ароматического рядов: C_nH_{2n+2} , C_nH_{2n} , C_nH_{2n-6} .

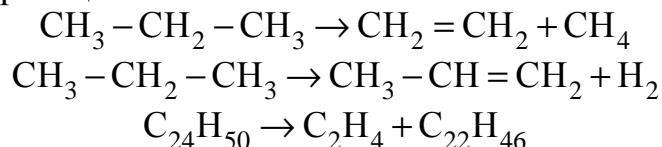
Алканы включают растворенные в нефти газообразные (C_1 – C_4), жидкие (C_5 – C_{15}) и твердые (выше C_{15}) гомологи метанового ряда, количество которых содержится в нефтях 30–50 %. Нафтены представляют собой моно-, би- полициклические структуры с боковыми цепями и без них, их содержится 25–75 %. Арены имеют моноциклические (бензол, толуол, ксилолы), би- и полициклические (нафталин, антрацен и др.) структуры. Аренов в нефти содержится 10–20 %. Кроме того, нефть содержит кислоты, фенолы, сернистые и азотистые соединения.

C	82–87 %	N	0,001–1,8 %
H	11–14 %	O ₂	0,5–1 %
S	0,1–7 %		

Комбинированная нефтепереработка (гидроочистка, каталитический крекинг, риформинг) с нефтехимическими процессами (пиролиз, синтез мономеров, полимеризация и др.) значительно расширяет возможность схем переработки с позиции концепции глубины и полноты переработки сырья (рис. 20). Идеальный вариант этих концепций – безотходное производство с глубиной 100 %.

1. Первичная переработка нефти на установках АВТ.
2. Вакуумная перегонка мазута ВТ.
3. Гидроочистка вакуумного газойля.
4. Каталитический крекинг.
5. Гидроочистка бензина.
6. Риформинг.
7. Разделение риформата.
8. Компаундирование.
9. Пиролиз.
10. Переработка пиролизной смолы.
11. Разделение газа пиролиза.
12. Алкилирование бензола.
13. Производство стирола.
14. Полистирол.
15. Полиэтилен.
16. Полипропилен.
17. ВСГ – водородсодержащий газ.

Основные реакции:



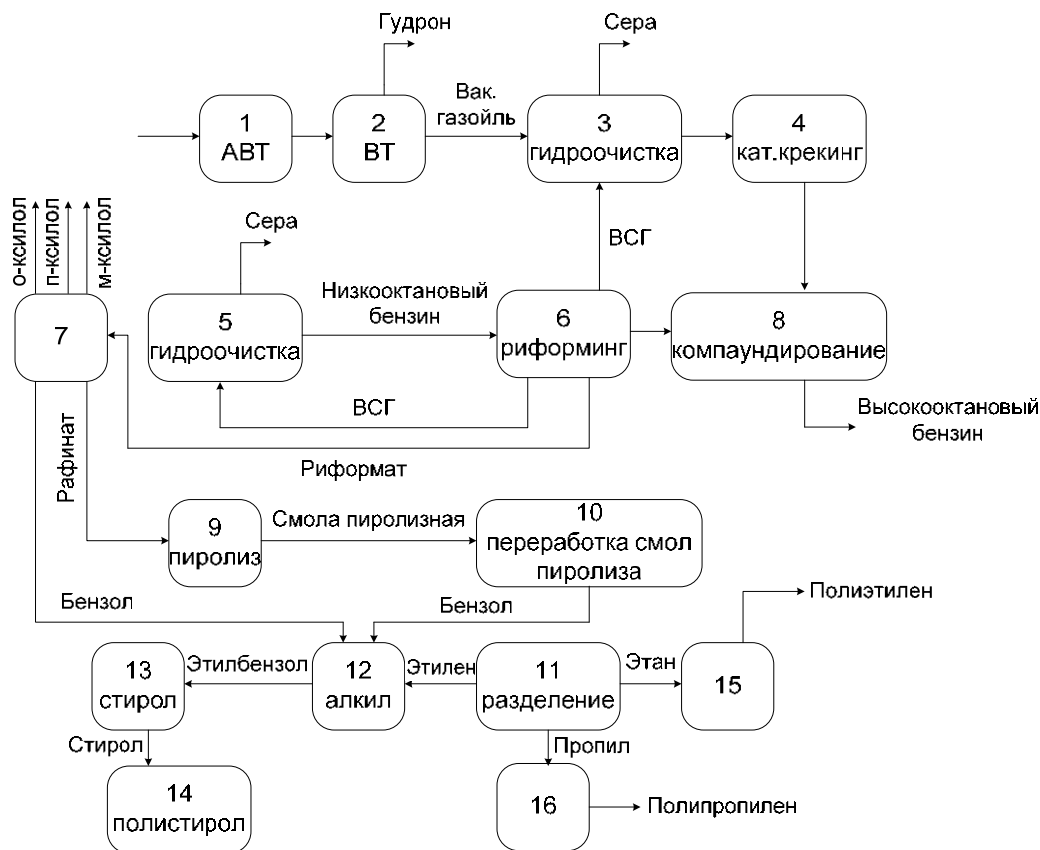


Рис. 20. Схема комбинированной переработки нефти

Схема неглубокой переработки нефти (рис. 21): бензиновая, керосиновая, дизельная фракции и мазут.

Бензиновая фракция – каталитический риформинг.

62...180 °C – изомеризация и пиролиз.

Керосиновые фракции – реактивное топливо.

120...140 °С – лакокрасочное производство.

Дизельные фракции – дизельное топливо.

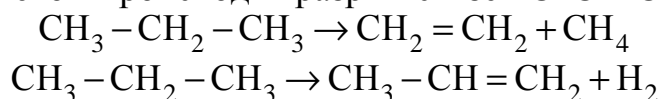
140...340 °C – парафины.

Мазут – остаток атмосферной перегонки.

Гудрон – остаток вакуумной перегонки мазута.

Глубина и полнота переработки сырья – использование ВСГ в гидроочистке сырья от серы. Минимизация энергетических и тепловых затрат.

Пиролиз – это процесс глубокого расщепления углеводородного сырья под воздействием высоких температур. Углеводороды парафинового, нафтенового строения и высшие олефины термодинамически нестабильны. При этом происходит разрыв связей С–С и С–Н.



Контрольные вопросы по разделу

1. В чем заключается необходимость использования концепций при проектировании и эксплуатации ХТС?
2. Основные принципы концепции глубины и полноты переработки сырья.
3. В чем суть концепции минимизации энергетических и тепловых затрат?
4. В чем заключается концепция минимизации отходов?
5. Основные элементы концепции оптимального использования оборудования.
6. К какой из концепций относится путь оптимизации технологических режимов ведения процесса?
7. Приведите и поясните общую схему концепций химического анализа производств и путей их реализации.

6. ОСНОВНОЙ ПРИНЦИП СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА – ВЗАИМОСВЯЗЬ ЯВЛЕНИЙ В ПРОЦЕССАХ И АППАРАТАХ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

Создание химико-технологических систем осуществляется решением двух задач: анализа и синтеза. Основным методом является математическое моделирование (системный анализ).

6.1. Задачи анализа и синтеза процессов и аппаратов химической технологии

6.1.1. Анализ процессов и аппаратов химической технологии

Задача анализа заключается в построении некоторой системы сведений о функционировании ХТС в зависимости от принятой химической схемы и принятых технологических связей в этой системе. Результат анализа зависит также от значений конструкционных и технологических параметров и, следовательно, от заданных свойств и показателей функционирования, имеющих оптимальное значение.

Для оценки оптимальных значений показателей вводится понятие критерия эффективности функционирования ХТС.

Критерий эффективности функционирования ХТС – это числовая функциональная характеристика системы, оценивающая степень приспособленности ХТС к решению поставленных перед ней задач.

Для решения задач анализа необходимо выполнение следующих основных этапов:

1. Технологический расчет ХТС или получение значений технологических параметров (температуры, давления и т. д.).

2. Техничко-экономический анализ ХТС. Он заключается в получении экономических критериев эффективности функционирования ХТС или расходных коэффициентов, затрат на производство, а также получении сведений о себестоимости продукции.

3. Анализ работы системы с точки зрения устойчивости, надежности и безопасности работы.

Критерий эффективности функционирования ХТС состоит из двух частей: технологической и экономической.

$$\bar{\Psi} = \bar{\Psi}_1 + \bar{\Psi}_2, \quad (22)$$

где $\bar{\Psi}_1$ – технологическая составляющая, которая включает выход продуктов и их качество; $\bar{\Psi}_2$ – экономическая составляющая, которая представляет собой сумму таких показателей, как прибыль, себестоимость, срок окупаемости предприятия.

В условиях рыночной экономики сюда включают маркетинговую характеристику.

При решении задач анализа ХТС необходимо учитывать, что ХТС может обладать свойствами, нехарактерными для ее отдельных элементов и подсистем, что обусловлено взаимозависимостью режимов элементов.

6.1.2. Материальный и тепловой балансы процессов и аппаратов химической технологии

Балансы химико-технологической системы составляются для стационарных процессов либо отдельных элементов. В последнем случае из схемы как бы вырезается элемент или группа элементов, или ХТС в целом. Например:

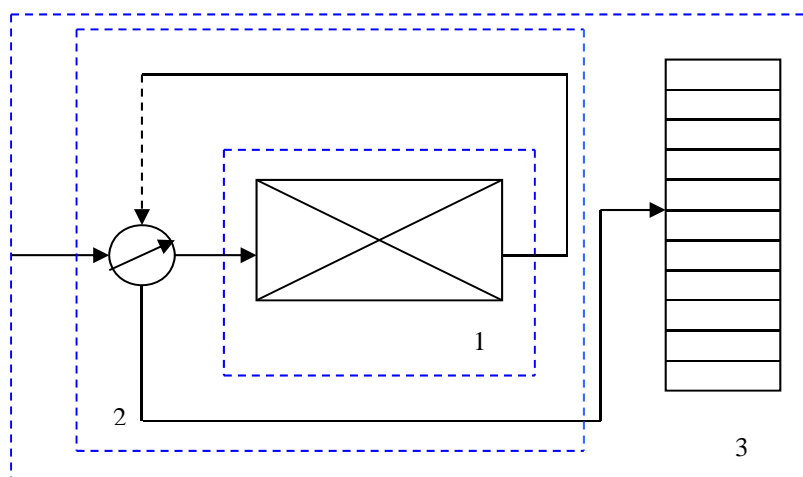


Рис. 22. Схема ХТС:

1 – элемент; 2 – группа элементов или подсистема; 3 – химико-технологическая система в целом

Подобный способ разложения на отдельные элементы или группы элементов дает информацию не только об эффективности химико-технологической системы, но и о ее составляющих, что позволяет выявлять узкие места, варьировать параметры элементов или их совокупность, тем самым оптимизируя работу системы.

В этом случае критерий эффективности для анализа ХТС составляется для отдельных элементов, подсистем и в конечном итоге ХТС в целом.

Таким образом, при решении задач анализа ХТС осуществляется декомпозиция на подсистемы с последующим анализом каждой подсистемы. Затем выполняется синтез результатов анализа подсистем.

Рассмотрим материальный и тепловой балансы реактора. При этом введем обозначения:

G_1, G_2, \dots, G_s – массы веществ, которые поступают в реактор;

G'_1, G'_2, \dots, G'_s – массы продуктов, выходящих из реактора.

Тогда уравнение материального баланса примет вид

$$\sum_{i=1}^s G_i - \sum_{j=1}^s G'_j = 0. \quad (23)$$

Уравнение теплового баланса:

$$Q_{\text{х.р.}} + \sum_{i=1}^s G_i \cdot H_i - \sum_{j=1}^s G'_j \cdot H'_j = 0, \quad (24)$$

где $Q_{\text{х.р.}}$ – теплота химической реакции; H_i, H'_j – энтальпии веществ, поступающих в реактор, и продуктов.

Данные уравнения позволяют рассчитать материальные и тепловые балансы для разомкнутых систем.

Для замкнутых систем при составлении баланса учитывается наличие рециркуляции технологических потоков. Уравнение материального баланса замкнутой системы имеет следующий вид:

$$G_n = G_0 + G_R, \quad (25)$$

где G_n – полный баланс системы; G_0 – баланс по свежему сырью; G_R – баланс по рециркуляту.

Коэффициент рециркуляции:

$$K_p = \frac{G_n}{G_0}. \quad (26)$$

Коэффициент отношения рециркуляции:

$$R = \frac{G_R}{G_n}, \quad (27)$$

тогда

$$K_p = \frac{1}{1-R}. \quad (28)$$

Термический крекинг – один из старейших процессов, который относится к вторичным процессам нефтепереработки. Вторичными называются процессы, в которых соединения нефти претерпевают химические изменения. При нагревании нефти до 400...500 °С происходит распад (крекинг) молекул исходных соединений нефти с образованием газообразных, жидких и твердых продуктов. Установки термического крекинга в России построены в 30–40-е годы прошлого века. Однако развитие каталитического крекинга и каталитического риформинга, позволяющих получать высокооктановый бензин, привело к тому, что в

настоящее время установки термического крекинга не используются. Но модификация этого процесса – висбрекинг – позволяет снижать вязкость тяжелого сырья, а также получать газ, бензин и дизельное топливо. Это происходит в результате растворения в легких продуктах тяжелых углеводородов.

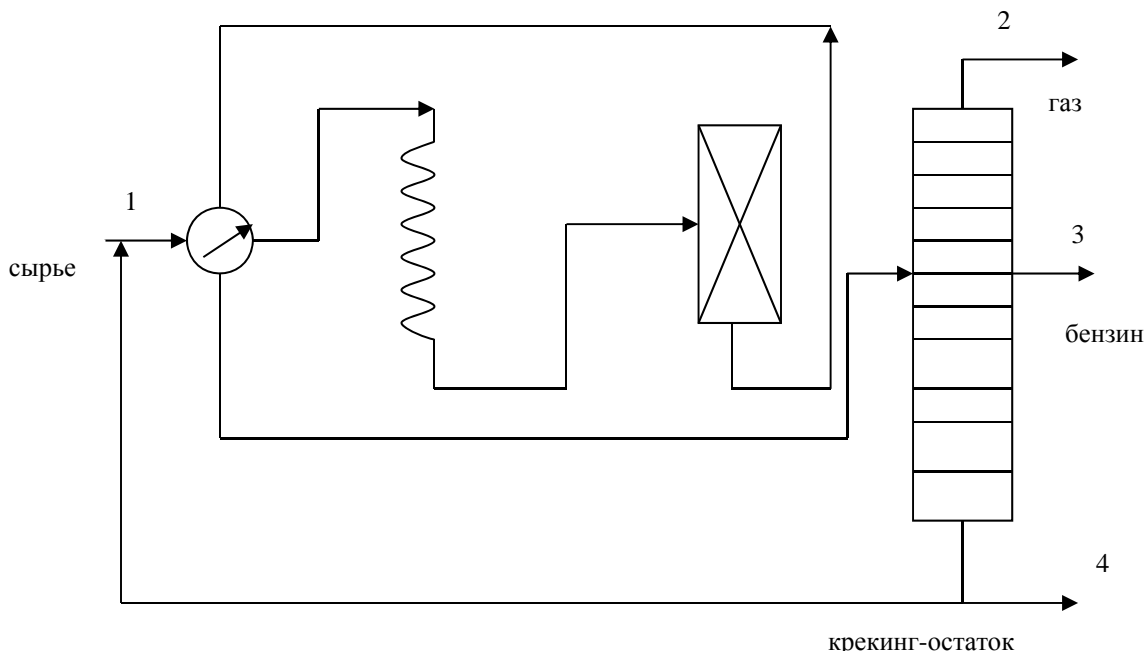


Рис. 23. Технологическая схема промышленного процесса термического крекинга:

1 – сырье; 2 – газ; 3 – бензин; 4 – крекинг-остаток

Сырье термического крекинга – гудрон – подается в сырьевой теплообменник и затем в печь, где нагревается до 460...500 °С при давлении 1,4...3,5 МПа, и подвергается крекингу в реакторе. Полученная смесь подается в колонну, где происходит разделение газа, бензина и крекинг-остатка. Газойлевая фракция частично используется в качестве орошения в колонне, как рециркулят и отводится с установки.

Установка термического крекинга предназначена для переработки 470 т/сутки газойля и получения светлых продуктов из тяжелого углеводородного сырья с температурой более 350 °С. Для увеличения степени превращения сырья в установке используется рецикл. Количество рециркулята может составлять 50...70 % к общему объему.

Исходные данные для расчета материального баланса (режим установившийся):

газ – 4,25 % мас.;

бензин – 17,73 % мас.;

рециркулят – 66,67 % мас.;

крекинг-остаток – 11,35 % мас.;

$$R = 66,67:100 = 0,6667;$$

$$K_p = 1:(1-0,6667) = 3;$$

$$C_{\text{газа}} = 3 \cdot 4,25 = 12,75;$$

$$C_{\text{бенз}} = 53,19;$$

$$C_{\text{кр. ост}} = 34,05;$$

$$G_{\text{газа}} = 470 \cdot 12,75:100 = 60 \text{ т/сут};$$

$$G_{\text{бенз}} = 470 \cdot 53,19:100 = 250 \text{ т/сут};$$

$$G_{\text{кр. ост}} = 470 \cdot 34,05:100 = 160 \text{ т/сут}.$$

По результатам расчета материального баланса составляются статьи прихода и расхода. В статье расхода записывается суточный баланс по сырью, в статье прихода – по продуктам.

6.2. Стратегия синтеза математического описания процессов и аппаратов химической технологии

Рассмотрено построение интеллектуальных систем, которые применяются для реализации стратегии системного анализа процессов и аппаратов химической технологии в режиме диалога.

Построение интеллектуальной системы представляет собой последовательность этапов разработки физико-химической модели и модели для представления знаний.

6.2.1. Моделирование кинетики гомогенных и гетерогенных реакций

Провести расчет кинетических параметров взаимодействия реагентов и количественную оценку скоростей протекания реакций позволяет **Физико-химическая модель**.

На основании этих расчетов разрабатываются математические модели каждого из аппаратов и всей химико-технологической системы в целом.

Модель для представления знаний в нечисловой форме позволяет использовать информацию о функционировании химико-технологической системы, составлять диалог пользователя интеллектуальной системой для расчета и оптимизации ХТС.

Первым этапом при разработке физико-химической модели является составление формализованного механизма или схемы превращения реагентов. При этом системный анализ является стратегией изучения химико-технологической системы. Сущность системного анализа заключается в том, что вся информация, полученная на лабораторных, промышленных и полупромышленных установках постепенно дополня-

ется и накапливается для построения общей модели ХТС. При этом вся информация делится на следующие группы:

1. Формализованный тип.
2. Неформализованный тип информации.

Формализованный тип информации обрабатывается с помощью математических моделей, которые написаны в виде функциональных зависимостей или знаковых моделей.

Неформализованные задачи решаются с помощью моделей, основанных на знаниях.

Построение математических моделей является наиболее трудоемким этапом разработки интеллектуальной системы.

Математические модели реакционных, массообменных и теплообменных процессов представляют собой некоторый функциональный оператор, алгебраический или дифференциальный, который связывает входные и выходные параметры аппарата.

6.2.2. Иерархическая структура математического описания процессов и аппаратов химической технологии

Следующим этапом после составления математического описания аппаратов при разработке интеллектуальной системы возникает необходимость синтеза математического описания химико-технологической системы в целом.

В основе данного синтеза заложен иерархический принцип, который заключается в том, что уравнения, описывающие элементарный процесс, уточняется на определенном уровне рассмотрения.

Всего этих уровней может быть четыре:

1. **Микроскопический, или молекулярный, уровень.** Здесь рассматриваются все основные процессы переноса вещества и энергии. При этом изучаются все возможные варианты реакций веществ, которые в конечном итоге приведут к получению заданного продукта. Результатом анализа процесса на данном уровне будет схема превращения.

2. **Уровень элементарного акта процесса.** Элементарный акт процесса – это физико-химический процесс, который протекает в минимально допустимых пространствах и временных масштабах, при которых он еще сохраняет все основные черты процесса, который моделируется. На этом этапе формируются начальные и граничные условия для уравнения переноса массы и энергии.

3. **Уровень аппарата в целом.** На этом этапе синтеза математического описания основное внимание уделяется структуре потоков материальных и энергетических в реальном аппарате определенной конструкции.

4. Уровень химико-технологической системы. На этом этапе составления математического описания разрабатывается некоторая топология системы, которая в конечном итоге задается коэффициентами связи между аппаратами с учетом рециркуляции.

Таким образом, сущность иерархического принципа синтеза математического описания процессов и аппаратов химической технологии заключается в том, что оно складывается из математического описания ключевых элементов предыдущего уровня.

Форма математического представления синтеза ХТС

$$M_n \in M_{n+1}, \quad (29)$$

где n – номер уровня.

Данная зависимость отображает взаимосвязь иерархических уровней при синтезе математического описания процессов и аппаратов химической технологии.

Следует отметить, что при составлении математического описания с использованием принципа иерархии справедливо сокращение числа переменных на каждом следующем уровне. Это связано с тем, что параметры и переменные, которые характерны для каждого структурного уровня, не должны входить в явном виде в математическое описание объектов на более высоком уровне. На практике это может быть реализовано путем применения математических процедур усреднения.

В общем случае модель любой химико-технологической системы включает: модели элементарных актов теплообменных, массообменных и реакционных процессов.

6.2.3. Элементарные акты химического превращения вещества в процессах и аппаратах химических производств

Элементарный акт – это взаимодействие реагирующих атомов, в результате чего происходит образование целевого продукта. При этом допустима формализация или сокращение числа элементарных актов.

Основным понятием формализованной кинетики является **скорость химической реакции**:

$$W_i = \lim_{\Delta\tau} \frac{\Delta n_i}{\Delta\tau} = \frac{dC_i}{d\tau}; \quad (30)$$

при $\Delta\tau \rightarrow 0$,

где C_i – концентрация реагирующего компонента; Δn_i – количество реагирующих молекул.

Для количественного описания элементарных актов химического превращения записываются следующие зависимости:

$$\frac{dC}{d\tau} = f(C_1, C_2, \dots, C_n, \bar{K}), \quad (31)$$

при условии, что $C_i = C_{i,0}$.

Здесь f – некоторая кинетическая функция, которая зависит от механизма химических превращений, \bar{K} – вектор констант скоростей реакций, приводящих к образованию целевых продуктов.

Вид кинетической функции может быть установлен теоретическими методами, если известны механизмы всех стадий.

Существуют процессы в химической технологии, которые имеют много стадий, для них невозможно записать детальный механизм превращения, так как образуется много промежуточных продуктов.

Для таких процессов используют полуэмпирические уравнения следующего вида:

$$\begin{aligned} A &\xrightarrow{K} \dots B; \\ \frac{dC_A}{d\tau} &= -KC_A^N; \\ \frac{dC_B}{d\tau} &= KC_A^N, \end{aligned} \quad (32)$$

где N – наблюдаемый порядок реакции, а точками обозначены промежуточные стадии.

При полуэмпирической записи кинетического уравнения промежуточные стадии не рассматриваются.

6.2.4. Взаимосвязь явлений в процессах энергомассопереноса

Все процессы в химико-технологической системе можно разделить на процессы переноса массы, энергии и движения. Для процессов переноса массы требуется наличие градиента массы. Это выражается в некоторой разности концентраций веществ, стремление системы к равновесию создает движущую силу процесса. Разность температур также обеспечивает движущую силу процесса теплообмена.

В любом случае для протекания процесса требуется изменение некоторого потенциала, который создает движущую силу.

Рассмотрим общий случай процесса энергомассопереноса.

Предположим, что в некоторой рассматриваемой области существуют некоторые неоднородные физические поля распределения.

$$df = \vec{n} \cdot d\sigma. \quad (33)$$

Неоднородность распределения потенциала приводит к нарушению термодинамического равновесия и созданию некоторого движения ве-

щества, которое характеризуется скоростью $\vec{v}(\vec{r}, \tau)$, а источники и стоки в этой области характеризуются объемной плотностью $\gamma(\vec{r}, \tau)$.

Вектор \vec{n} движется в направлении участка $d\sigma$, в результате создаются неоднородности поля для того, чтобы вернуться в термодинамическое равновесие.

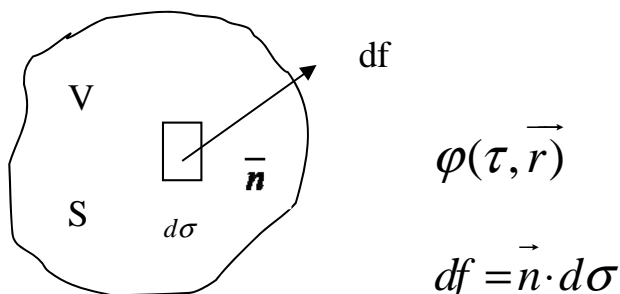


Рис. 24. Рассматриваемая область:

$\phi(\vec{r}, \tau)$ – потенциал поля; \vec{r} – пространственная составляющая;
 τ – временная составляющая

Неоднородность поля может быть вызвана разностью энергии, концентрации или плотности. Это является причиной возникновения потоков переноса. При разности в давлении мы имеем поток массы, при разности концентраций – процессы химического превращения веществ.

В общем случае в рассматриваемой области может происходить движение вещества. Это движение характеризуется некоторой скоростью $\vec{v}(\vec{r}, \tau)$, а источники и стоки потенциала переноса характеризуются некоторой плотностью $\gamma(\vec{r}, \tau)$.

Если мы рассматриваем некоторый поток через поверхность, то справедлива следующая запись:

$$\frac{\partial \phi}{\partial \tau} = -\text{div} Q + \vec{\gamma}, \quad (34)$$

$$Q = \vec{v}\phi + \vec{q},$$

где Q – некоторый поток через поверхность.

В случае переноса массы

$$\phi = \frac{1}{n} \vec{\rho}. \quad (35)$$

В случае переноса тепла

$$\phi = \frac{1}{n} \vec{\rho} \cdot C_v T. \quad (36)$$

В случае переноса движения

$$\phi = \frac{1}{n} \vec{\rho} \vec{v}, \quad (37)$$

при $\vec{\rho} = \text{const}$.

Первый частный случай – конвективный перенос. Известное в гидродинамике уравнение неразрывности, которое позволяет связать φ с движением какого-либо потока.

$$\frac{\partial \varphi}{\partial \tau} + \operatorname{div}(\rho \vec{v}) = 0; \quad Q = (\rho \vec{v}). \quad (38)$$

Второй случай – закон Фурье:

$$Q = -\lambda \nabla T, \quad (39)$$

где λ – теплопроводность.

Третий частный случай – уравнение переноса в пористых структурах (закон Фика):

$$Q = -D_{\text{эф}} \nabla \rho. \quad (40)$$

Четвертый частный случай – уравнение движения Эйлера – уравнение переноса импульса в случае возникновения разности давления.

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial \tau} + (\vec{v} \nabla) \vec{v} = q = \frac{1}{\rho} \nabla P, \quad (41)$$

$$Q = \frac{1}{\rho} \nabla P, \quad (42)$$

где \vec{v} – вектор скорости движения. Это уравнение связывает возникновение неоднородности, выражаемое некоторой скоростью \vec{v} с градиентом давления P .

6.2.5. Определение значений кинетических параметров при математическом моделировании процессов и аппаратов химической технологии

В математическом моделировании процессов химических превращений возникает задача определения численных параметров, которые входят в уравнение, в зависимости от типа процесса химического производства уравнения могут быть составлены на основании закона действующих поверхностей.

И в том, и в другом случае правая часть уравнения содержит неизвестные кинетические параметры, которые могут быть рассчитаны по экспериментальным данным, измеренных в опыте концентраций продуктов реакций с использованием специальных компьютерных методов обработки.

В этом случае говорят о решении обратной кинетической задачи, так как по конечным результатам процесса, а именно, концентрациям продуктов рассчитываются исходные данные или параметры модели.

6.2.6. Решение обратной кинетической задачи

В математической форме любую систему уравнений модели можно представить в виде

$$\overrightarrow{AK} = \overrightarrow{C}, \quad (43)$$

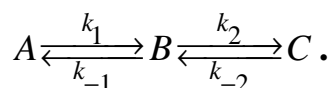
где C – вектор измеренных концентраций продуктов; K – вектор констант скоростей реакции, протекающих в процессе; A – некоторый оператор, алгебраический или дифференциальный.

Тогда можно записать

$$K = A^{-1}\overrightarrow{C}; \quad (44)$$

где A^{-1} – обратный оператор для A .

Уравнение (43) – прямая кинетическая задача, уравнение (44) – обратная кинетическая задача.



Изменение концентраций каждого вещества по времени контакта может быть представлено системой уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{dC_a}{d\tau} &= k_{-1}C_b - k_1C_a; \\ \frac{dC_b}{d\tau} &= k_{-1}C_a - k_{-1}C_b + k_{-2}C_c - k_2C_b; \\ \frac{dC_c}{d\tau} &= k_2C_b - k_{-2}C_c, \end{aligned} \quad (45)$$

при $\tau=0$, $C_a = C_{a0}$, $C_b = C_{b0}$, $C_c = C_{c0}$.

Мы имеем систему из трех кинетических уравнений с четырьмя неизвестными параметрами, которые подлежат определению: k_{-1} , k_1 , k_{-2} , k_2 .

Это означает неединственность или некорректность задачи с точки зрения математики.

6.2.7. Составление регулирующего алгоритма

Регуляризация заключается в том, что обратный оператор A^{-1} заменяется на $A^{-1}\overrightarrow{C}$, где \overrightarrow{C} – вектор концентрации продукта, который измеряемого экспериментально с некоторой погрешностью δ .

В результате получаем, что при условии $\delta \leq \delta_0$.

$$\rho_k = \left\| \overrightarrow{K} - \overrightarrow{K}^i \right\|^2 \leq \varepsilon, \quad (46)$$

где ρ_k – невязка или погрешность, причем $\rho_k = f(\delta)$; \bar{K} – точное решение обратной кинетической задачи или вектор констант скоростей реакций; \bar{K} – приближенное решение.

Для определения соответствия \bar{K} и \bar{K} составляется **функционал Тихонова**.

$$\hat{O}(\bar{K}) = \sum_{l=1}^N \|\bar{C}_p - \bar{C}_y\|^2 + \Omega, \quad (47)$$

где l – число опытов, в результате чего мы определяем C_y ; \bar{C}_y – экспериментальное значение концентрации вещества в продукте; \bar{C}_p – рассчитанное по модели значение концентраций веществ; Ω – стабилизирующая поправка.

$$\Omega = \alpha \|C_p\|^2. \quad (48)$$

Тогда получим

$$\hat{O}(\bar{K}) = \sum_{l=1}^N \|\bar{C}_p - \bar{C}_y\|^2 + \alpha \|C_p\|^2. \quad (49)$$

Таким образом, решение обратной кинетической задачи заключается в определении значений \bar{E} , из условия минимума функционала Тихонова.

6.2.8. Расчет параметров регуляризации

В функционал Тихонова входит параметр регуляризации α , подлежащий определению.

Для определения α используется следующая итерационная процедура:

$$(*) \rho_k(\alpha) = \|\bar{A}_{ka}^{\delta} - \bar{C}_y\| = \delta, \quad (50)$$

где δ – погрешность концентраций.

Полагаем, что на первом этапе $\alpha_0 = \delta$, на втором этапе определяем минимум $\hat{O}(\bar{K}_a^{\delta})$ при заданном значении α_0 .

Все последующие значения α определяются по формуле $\alpha_{n+1} = \frac{\alpha_n}{J}$.

Контрольные вопросы по разделу

1. В чем заключается задача анализа ХТС?
2. Что такое критерий эффективности функционирования ХТС?
3. Перечислите основные этапы для решения задач анализа ХТС.

4. Перечислите основные этапы для решения задач синтеза ХТС.
5. Что включают в себя физико-химические основы моделирования кинетики гомогенных и гетерогенных реакций?
6. Основные этапы иерархического принципа синтеза математического описания.
7. Что такое элементарный акт химического превращения вещества?
8. Основные этапы моделирования элементарных актов химического превращения вещества.
9. Какие процессы или явления при моделировании ХТС описывает уравнение Умова?
10. В чем суть решения обратной кинетической задачи?
11. Что такое регуляризация и от каких параметров она зависит?

7. СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПО ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМ, ЭКОНОМИЧЕСКИМ И ЭКОЛОГИЧЕСКИМ КРИТЕРИЯМ

С позиций системного анализа изучение и оптимизация любого химического производства проводится в несколько этапов. Различают также уровни оптимизации химических производств.

7.1. Постановка задачи оптимизации процессов и аппаратов химической технологии

Наивысший уровень при этом составляет какая-то химическая отрасль или комбинат. На этом уровне оптимизируются не только работы какого-то подразделения, но и взаимосвязь объектов.

Низший уровень иерархии для оптимизации представляет собой элементарный процесс (химического превращения, массообмена, энергопереноса и т. д.).

В зависимости от уровня оптимизации записывается критерий эффективности функционирования ХТС.

7.2. Основные этапы системного анализа процессов и аппаратов химической технологии

При оптимизации на любом уровне можно выделить следующие основные этапы:

1. Общий анализ задачи оптимизации.

На данном этапе определяется цель оптимизации, формулируются исходные данные и конечные результаты.

2. Составление целевой функции оптимизации или критерия эффективности.

3. Выбор оптимизируемых параметров и анализ влияния их на целевую функцию.

4. Составление математической модели химического производства на соответствующем уровне (модель отдельного процесса, модель промышленной установки, модель производства в целом или производственной отрасли).

5. Решение системы уравнений математической модели.

6. Выбор метода оптимизации (прямой перебор, декомпозиция и другие).

7. Проведение оптимизационных расчетов.

На любом этапе для решения задачи оптимизации необходимо наличие целевой функции и оптимальных параметров. В качестве целевой функции или критерия эффективности используются технологические, экономические и экологические показатели химических производств. Для составления целевой функции необходимо выполнение трех основных операций:

1. Построение физико-химической модели, которая позволяет определить скорость процесса. На микроуровне конечным результатом этой операции является схема реакций какого-то процесса, кинетическая модель этого процесса и распределение продуктов реакций в зависимости от времени контакта.

2. Вторая операция позволяет учесть наложение гидродинамических и тепловых осложнений. Структура этих явлений определяется конструктивными особенностями промышленных аппаратов (модель идеального вытеснения, идеального смешения, движение потоков в пористом зерне катализатора и др.).

3. Третья операция предполагает подключение экономических и экологических оценок, позволяющих учесть эффективность функционирования химических предприятий, в этом случае ко второй операции добавляются факторы, которые качественно и количественно влияют на химическое производство.

Например, известно, что технологические схемы с рециклом по непревращенному сырью увеличивают степень превращения сырья в продукт, но в этом случае решающим фактором являются экономические затраты, которые необходимо сделать для энергетической организации рецикла (подключение компрессоров, трубопроводов).

Критерий эффективности вместе с физико-химической моделью процесса называют одним термином – **экономико-математическая модель**.

Результатом использования данной модели являются показатели, отвечающие интересам химического предприятия.

Для оценки эффективности функционирования предприятия необходимо знать расходы на сырье и электроэнергию, а также на другие издержки, необходимые для работы предприятия.

В общем случае различают следующие категории расходов:

$$C = C_1 + C_2 + C_3 + C_4; \quad (51)$$

где C – общий расход; C_1 – капитальные затраты; C_2 – эксплуатационные расходы; C_3 – расходы на поток, которые включают затраты на поддержание необходимой скорости подачи сырья и давления в системе; C_4 – тепловые расходы, включающие затраты на нагрев и охлаждение рабочего потока.

Исходя из определения расходов вводится понятие «общей функции выгоды»:

$$P = \lambda Q (S_{\text{вых}} - S_{\text{вх}}) - C, \quad (52)$$

где λ – скорость потока; Q – функция потока; $S_{\text{вых}}$, $S_{\text{вх}}$ – стоимость выходного и входного потоков, соответственно; C – затраты.

При оценке эффективности функционирования химического производства, наряду с общей функцией выгоды P , может быть использована технико-экономическая оценка по приведенному расходу:

$$B_{\text{прив}} = (\sum B_i \Pi_i) - C_{\text{экс}} - EK_t, \quad (53)$$

где $B_{\text{прив}}$ – записанный в такой форме доход позволяет оценить эффективность строительства некоторого химического предприятия, которое проектируется; B_i – количество i -го вида продукции; Π_i – цена i -го вида продукции; $C_{\text{экс}}$ – эксплуатационные затраты; E – нормативный коэффициент эффективности капиталовложений; K_t – производственные фонды, т. е. затраты с учетом временного фактора.

Для оптимизации действующих химических производств $EK_t = 0$. В этом случае $B_{\text{прив}}$ – разность между доходом и затратами.

Критерий эффективности в общем случае состоит из трех основных частей:

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 + \Psi_3, \quad (54)$$

где Ψ_1 – технологические показатели; Ψ_2 – экономические показатели; Ψ_3 – экологические показатели.

Например, для промышленных процессов производства бензинов из нефти технологической составляющей Ψ_1 является октановое число продукта и процентный выход бензина на нефть, Ψ_2 – экономическим показателем для производства будет функция выгоды или приведенный доход, Ψ_3 – показатель, характеризующий экологические показатели продукта. Для нашего случая это концентрация бензола в товарном бензине (по ГОСТу она должна быть $< 0,5 \%$).

При оптимизации вводят понятия **выходных, входных и внутренних параметров ХТС**.

Выходные параметры характеризуют состояние системы и определяются компонентами вектора \bar{y} .

Входными параметрами системы \bar{x} являются характеристики сырьевого потока, а также параметры различных физико-химических воздействий окружающей среды на функционирование ХТС. Входные параметры могут быть двух видов: заданные и рассчитываемые.

Внутренние параметры ХТС подразделяются на конструкционные, технологические и структурные.

Технологические параметры определяются режимом работы технологической установки: температурой процесса, скоростью подачи сырья, химическим составом сырья, давлением.

Конструкционные параметры определяются конструкцией аппаратов и геометрическими характеристиками.

Например, модель идеального смешения или идеального вытеснения при расчете реакторов определяется по конструкционным характеристикам, при поршневом движении $L/D > 30$.

Структурные параметры – это коэффициенты структурного разделения потоков и коэффициенты рециркуляции системы. Эти параметры, как правило, определяют топологию ХТС.

Таким образом, решение задачи оптимизации сводится к определению технологических, конструкционных и структурных параметров ХТС, обеспечивающих оптимальное значение обобщенного критерия функционирования ХТС.

Для решения задачи оптимизации могут быть использованы специальные математические методы для поиска экстремума целевой функции, составляющиеся на основании критерия эффективности. Задача оптимизации является многокритериальной, так как обобщенный критерий функционирования ψ состоит из трех основных частей, каждая из которых может включать один и более показателей.

7.3. Критерии для системного анализа процессов и аппаратов химической технологии

Вследствие взаимосвязанности процесса тепло- и массообмена химическое производство характеризуется множеством различных свойств. Носитель того или иного свойства производственной системы называется *параметром качества* или свойства и обозначается **критерием эффективности**.

7.3.1. Классификация критериев оптимизации

Критерий эффективности функционирования производственной системы, как числовая характеристика, оценивает степень ее приспособленности к решению поставленных перед нею задач. На практике различают следующие критерии:

1. Оценка степени использования сырья, а также энергии, качества выпускаемой продукции. Такими критериями являются на практике степень превращения сырья в продукты, которая равна процентному отношению продукта к сырью; выход целевого продукта или селективность; энергетический коэффициент полезного действия.

2. Оценка качества функционирования производственной системы. Таковыми критериями являются надежность, устойчивость в аварийных ситуациях, степень соответствия выпускаемой продукции, гостированное качество.

3. Экологические критерии. К ним относятся степень загрязнения среды, количество выбрасываемых в атмосферу вредных отходов, а также экологические ГОСТы на выпуск продукции. Экологические критерии являются численным выражением концепции утилизации отходов.

4. Социально-психологические критерии. К ним относятся условия работы на производственных местах, степень автоматизации системы.

5. Экономические критерии: себестоимость, доход, маркетинговый характер.

В условиях рыночных отношений стал значимым маркетинговый критерий, отражающий соответствие спроса и предложения продукции на рынке.

Поскольку имеется пять видов критериев, которым должна удовлетворять производственная система, при проектировании и эксплуатации ХТС, приходится выбирать режимы функционирования, при которых производственная система максимальным образом удовлетворяла бы всем видам перечисленных критериев.

Рассмотрим графически два возможных варианта.

1-й вариант

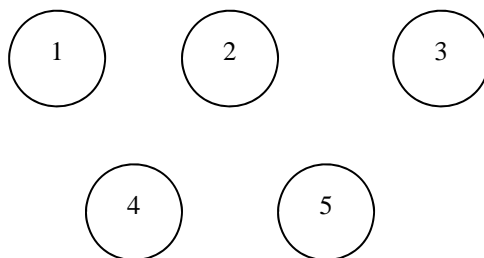


Рис. 25. Множество критериев

В этом случае критерии не имеют общей области.

2-й вариант

Критерии имеют общую подобласть.

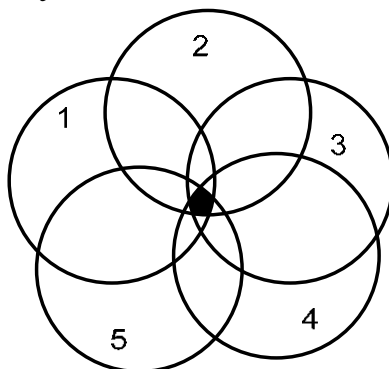


Рис. 26. Изображение общей области: • – общая область

В первом варианте необходимо решать задачу многокритериальной оптимизации. Во втором варианте необходимо использовать экспертные оценки для поиска оптимальной области, которые существуют в виде сегмента •.

В первом варианте определяется такой оптимальный режим функционирования производственной системы, который как можно ближе соответствует значениям всех перечисленных критериев.

Во втором варианте по средствам экспертных оценок или при многократном решении задачи анализа определяется значение критериев и общая для них область •. При решении задачи анализа определяются такие технологические режимы, при которых все пять перечисленных критериев имеют экстремальные значения, то есть максимальную стоимость и минимальные затраты.

При проектировании новых и оптимизации действующих производственных систем необходимо рассчитывать численные значения перечисленных критериев с целью поиска оптимальной области.

Проектирование ХТС – это создание в установленные сроки комплекса технологической документации, необходимой для строительства химического предприятия для производства требуемого количества продукции заданного качества с оптимальными технико-экономическими показателями.

Эксплуатация химического предприятия – это использование по назначению данной производственной системы для производства продукции нужного качества.

Основная задача при эксплуатации – повышение эффективности, которая может быть решена в том числе при использовании метода математического моделирования.

Математическая модель, если она адекватна к реальному процессу, позволяет определить оптимальную область (вариант 2) с использованием ЭВМ. Частным случаем эксплуатации химического предприятия является его реконструкция, которая представляет собой переоборудование или переустройство производства, а также замену устаревшего морально и физически оборудования на более современное.

Решение задачи реконструкции проводится без строительства новых и расширения существующих производственных площадей.

7.4. Мультиобъектный анализ химических производств

Задачи многокритериального или мультиобъектного анализа определяются на основе задачи, поставленной при оптимизации процессов и аппаратов химических производств.

7.4.1. Задачи анализа процессов и аппаратов химической технологии

На данном этапе оптимизации процессов и аппаратов химической технологии необходимо определить экстремум одновременно по всем частным составляющим обобщенного критерия эффективности функционирования химико-технологической системы. При этом, как правило, эти составляющие противоречат друг другу, поэтому не всегда удастся определить единственный набор оптимизируемых параметров (технологических, конструкционных и структурных), обеспечивающий экстремум обобщенного критерия эффективности по всем составляющим.

Например, повышение качества продукта в большинстве случаев приводит к снижению выхода целевого продукта и увеличению его стоимости, таким образом, трудно определить единый набор характеристик технологического режима промышленного процесса, который бы одновременно обеспечивал заданный выход продукта наилучшего качества.

Многокритериальный анализ позволяет определить и сформулировать критерий эффективности, который учитывает противоречия его отдельных составляющих.

При этом пиковые значения по отдельным составляющим или элементам критерия принимаются с некоторыми допущениями, которые необходимы для достижения конечной цели – определение наилучшего режима функционирования химико-технологической системы по всей совокупности параметров и показателей.

7.5. Компромиссное решение при оптимизации процессов и аппаратов химической технологии

Компромиссным называется такое решение, которое наилучшим образом соответствует цели, поставленной задачи оптимизации.

На практике компромиссных решений, как правило, бывает несколько. Для наглядного представления компромиссного решения в задаче оптимизации выберем два критерия (F_1 и F_2), являющиеся непрерывными функциями оптимизируемых параметров x_1, x_2, \dots, x_n .

Пусть F_1 характеризует качество выпускаемой продукции, а F_2 – объем выпуска. В качестве оптимизируемых параметров можно взять показатели технологического режима работы промышленной установки (температура, расход сырья и т. д.). Естественно, что, изменяя значения оптимальных параметров, мы будем изменять значения критериев. Наша цель – определить такие значения x_1, x_2, \dots, x_n , обеспечивающие одновременно максимальное значение $\{F_1\}$ и $\{F_2\}$.

Эти два критерия противоречат друг другу, поэтому решение должно быть компромиссным.

В силу непрерывности функций $F1$ и $F2$ существует некоторая непрерывная функция Ω , в ней определены все возможные значения критериев.

В общем случае: \bar{x} – область параметров; Ω – область целей.

Каждому определенному значению $F1$ и $F2$ соответствует точка области Ω .

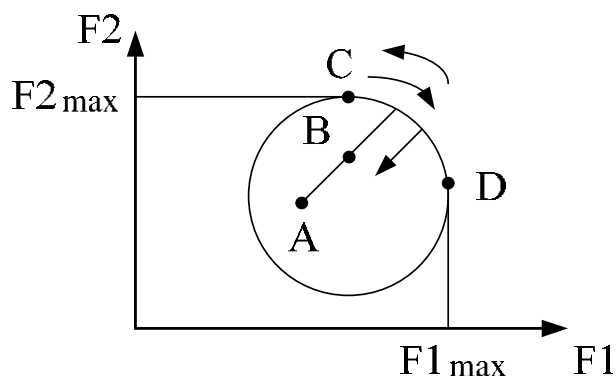


Рис. 27. Зависимость критерия качества выпускаемой продукции $F1$ от критерия объема выпуска $F2$

Все точки области Ω делятся на улучшаемые и неулучшаемые с точки зрения максимального значения критериев. Выберем произвольно точки A и B внутри области. Очевидно, что точка B лучше, чем точка A . Проведем линию между точками A и B до пересечения с границей области. Двигаясь вдоль этой линии к границе области, мы будем улучшать наше решение. На границе области это улучшение прекращается. Обведем линию CD . Максимум $F2$ – в точке C , максимум $F1$ – в точке D . Двигаясь по линии CD в любом направлении, не выходя за границу области, мы будем ухудшать значения одного или другого критерия. В силу этого множество точек на линии CD называются **компромиссными**. А значения оптимальных параметров, соответствующих этому компромиссному решению, называются **эффективными**.

Например, эффективным является решение о выделении дизельной фракции из нефти, так как увеличивают четкость разделения фракции и тем самым повышают качество дизельного топлива, снижают объем выпуска этого вида продукции. Рассмотрим частные случаи нашей постановки.

На рис. 28 отрезок между точками A и B не принадлежит области компромиссов. На рис. 29 множество компромиссов сводится к одной точке A . На рис. 30 участки границы области допустимых решений, параллельные осям координат не принадлежат множеству компромиссов,

поскольку все эти точки могут быть улучшены в точках граничной линии АВ.

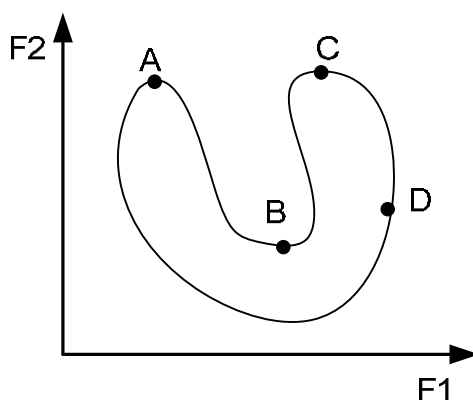


Рис. 28. Зависимость критерия объема выпуска F_2 от критерия качества выпускаемой продукции F_1

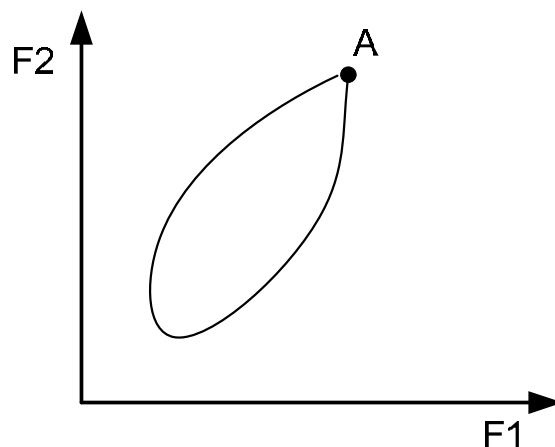


Рис. 29. Зависимость критерия объема выпуска F_2 от критерия качества выпускаемой продукции F_1

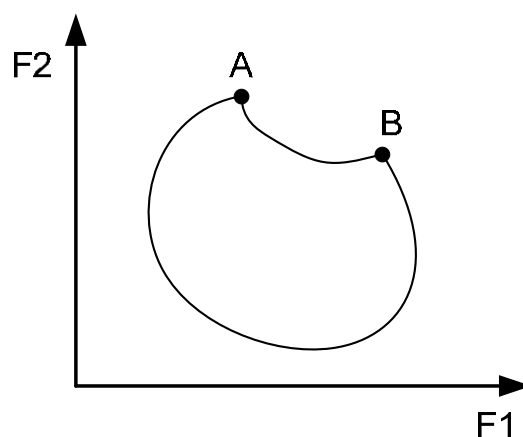


Рис. 30. Зависимость критерия объема выпуска F_2 от критерия качества выпускаемой продукции F_1

Таким образом, компромиссной является область решений, в которой улучшение решения по одному критерию приводит к ухудшению решения по другому критерию.

7.6. Методы решения задач многокритериального анализа

Рассмотрим методы решения многокритериальных задач. Все методы делятся на три группы:

1. Методы с использованием обобщенного критерия.
2. Методы с использованием схем компромиссов.
3. Методы с использованием неопределенных множителей Лагранжа.

При составлении обобщенного критерия принимается во внимание, что всевозможные частные критерии принадлежат одному из следующих трех классов.

Первый класс – это множество критериев качества. В этом случае все частные критерии имеют различную размерность и различную физическую природу.

В качестве примера можно привести организацию работы реактора, где в качестве частных критериев выступают размер и стоимость. Эти показатели желательно уменьшать, а также удельная производительность и срок службы реактора. Данные показатели желательно увеличить.

Второй класс – множество объектов. В этом случае оптимальная система состоит из элементов, каждый имеет свой частный критерий. В этом случае размерность критериев и их физическая природа одинаковы.

Примером может служить любая ХТС, если каждый аппарат в ней, входящий в качестве частного критерия, будет иметь удельную производительность.

Третий класс – множество условий функционирования. В этом случае также все частные критерии имеют одну размерность и одну физическую природу.

Примером может служить анализ работы реактора за весь срок службы катализатора.

Рассмотрим варианты записи обобщенного критерия.

1. Запись с применением операций нормирования. Этот способ чаще всего применяется для задач, которые принадлежат первому классу. Все частные критерии в этом случае приводятся к безразмерному виду следующим образом. Вводится понятие $F_{ид}$ – идеальное, может быть определено интуитивно по результатам анализа работы некоторого хи-

мического предприятия за определенный период. Тогда значения i -го нормированного критерия запишется следующим образом:

$$F_{\text{н}}^i = \frac{F^i}{F_{\text{ид}}^i}, \quad (55)$$

где $F_{\text{н}}^i$ – нормированный i -й критерий.

2. Запись обобщенного критерия через определенный интервал изменения.

В этом случае

$$F_i^i = \frac{F^i}{(F_{\text{max}}^i - F_{\text{min}}^i)}, \quad (56)$$

После нормировки обобщенный критерий функционирования может быть записан так:

$$1. F_{\text{общ}} = \sum_{i=1}^N F_{\text{н}}^i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (57)$$

где N – количество частных критериев.

Данный критерий называется **аддитивным**.

$$2. F_{\text{общ}} = \sum_{i=1}^N \alpha_i F_{\text{н}}^i, \quad \text{при условии, что } \sum_{i=1}^N \alpha_i = 1, \quad (58)$$

где α – весовой коэффициент, определяется степенью значимости определенного частного критерия. Предельные случаи для α_i следующие:

$\alpha_i = 1$ и $\alpha_j = 0, i = 1, 2, \dots, N, i \neq j$.

$$3. F_{\text{общ}} = \prod_{i=1}^N F_{\text{н}}^i, \quad (59)$$

Данный критерий является **мультипликативным**.

$$4. F_{\text{общ}} = \prod_{i=1}^N \alpha_i F_{\text{н}}^i, \quad \text{при условии, что } \sum_{i=1}^N \alpha_i = 1, \quad (60)$$

где α_i – коэффициент важности, значимости.

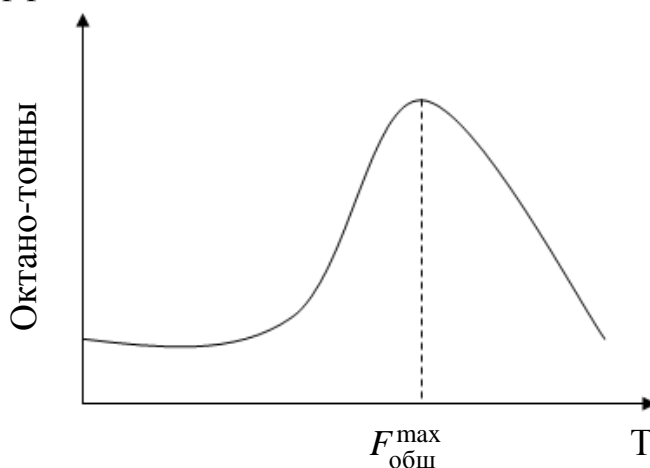


Рис. 31. Зависимость октано-тонн от температуры

В качестве примера записи мультипликативного критерия может служить производственная характеристика октано-тонна. Это произведение октанового числа на выход в процентах. Зависимость этого критерия от температуры процесса переработки нефти в бензин носит пиковый характер.

Экстремум данной зависимости объясняется повышением скорости реакции при повышении температуры, также увеличение скорости побочных реакций газообразования, снижающие выход. Именно этим с химической точки зрения объясняется наличие максимума на кривой.

7.7. Процесс компаундирования товарных бензинов

Современные моделирующие системы моделирования (Aspen PIMS, RPMS, Blend-2000 и др.), которые начали разрабатывать с 90-х прошлого века неспециалистами химиками-технологами, не учитывают физико-химическую сущность процессов, а используют феноменологическую схему оптимизации технологических процессов, в частности процесса компаундирования при приготовлении товарных бензинов, многокомпонентной ректификации нефтей и тем более каталитических реакторных процессов. Следствием этого явилось наличие системной ошибки в полученных результатах по качеству продукции и экономическим показателям ее получения. Например, в процессе компаундирования неучет химического взаимодействия между отдельными компонентами смеси (углеводородными потоками, антидетонационными присадками, оксигенатами) приводит к расхождению величины октановых чисел расчетных и экспериментально определенных на установках УИТ. Принципиальным следствием этого является: а) ухудшение качества продукции – товарных бензинов; б) снижение экономических показателей за счет перерасхода дорогостоящих компонентов, используемых при компаундировании. При больших объемах производства товарной продукции экономические показатели могут достигать значительной величины. Расчет рецептуры бензина осуществляется, исходя из параметров и свойств компонентов смешения, которые используются для производства определенной партии бензина. Это позволяет снизить риски производства некондиционных партий бензина, а также сэкономить на дорогостоящих компонентах – алкилатах, изомеризатах, высокооктановых добавках. Расширение списка резервуаров и потоков компонентов бензинов также требует привязки к конкретным полям из базы данных завода при участии специалистов АСУ ТП завода. В Программном комплексе предусмотрена загрузка отчета программы PIMS с возможностью выбора периода для выработки более детального календарного

плана (рецептуры на каждые сутки в зависимости от заданных условий). Высокооктановый автомобильный бензин – это один из наиболее востребованных продуктов нефтепереработки, спрос на который повышается с каждым годом. Основным потребителем бензина на ближайшие десятилетия является автомобильный транспорт, в связи с тем, что подавляющее большинство транспортных средств оснащено бензиновыми или дизельными двигателями. Увеличение выпуска моторных топлив является приоритетным направлением для нефтеперерабатывающих предприятий, ориентированных на вторичную переработку нефтяного сырья. Автомобильные бензины производятся путем смешения (компаундирования) компонентов вторичной переработки нефти с высокооктановыми добавками и присадками. Процесс осуществляется на станциях смешения (ССБ) по определенной рецептуре в соответствии с текущими стандартами качества ГОСТ. Разработка рецептур проводится, как правило, в несколько этапов – долгосрочное и краткосрочное планирование выпуска бензина, а также текущие рецептуры, которые должны выполняться с учетом маркетинговых характеристик и наличия ресурсов смешения (уровни в резервуарах). Наиболее важными высокооктановыми компонентами являются: алкилбензин, изомеризат, бензин каталитического риформинга, метил-трет-бутиловый эфир (МТБЭ). Продукты процессов изомеризации и алкилирования являются наиболее ценным и, как следствие, дорогим сырьем в силу своих высоких качественных показателей, в то время риформат, как правило, является базовым компонентом бензина, с относительно невысокой себестоимостью. Реальное использование тех или иных компонентов диктуется текущими режимами работы установок вторичной переработки нефти и показателями качества соответствующих продуктов, а также экономическими показателями и плановыми заданиями по выпуску определенной продукции. Оптимизация процесса компаундирования производится за счет рационального вовлечения потоков точным расчетом рецептур смешения. Это приводит к экономии дорогостоящих компонентов топлива, снижению излишнего запаса по октановому числу, бензолу и сере, что дает непосредственный экономический эффект для предприятия. Расчеты показали, что если содержание бензола в товарном бензине находится в допустимой области (менее 1 % об., согласно требованиям Евро-5). Корректировка рецептуры с тем, чтобы содержание бензола варьировалось в интервале 0,90...0,95 % об., принесет положительный эффект, поскольку это даст возможность вовлекать больше высокооктановых платформатов, при экономии на дорогостоящих компонентах (алкилате и изомеризате).

Таблица 4

Требования ЕЭС к автобензинам

Показатель	Евро-2	Евро-3	Евро-4	Евро-5
Содержание бензола, %, мах.	5,0	1,0	1,0	1,0
Содержание серы, ppm, мах.	500	150	50	10
Содержание ароматических углеводородов, %, мах	–	42	35	35
Содержание олефиновых углеводородов, %, мах.	–	18	18	14
Содержание кислорода, %, мах.	–	2,3	2,7	2,7
Фракционный состав:				
до 100 °С перегоняется, не менее	–	46	46	46
до 150 °С перегоняется, не менее	–	75	75	75
Давление насыщенных паров, кПа, не более	–	60	60	60

Сегодня смешение компонентов на Российских НПЗ производится отдельными партиями. Компоненты направляются посредством ручного управления в резервуары вторичных конечных продуктов. После притока в резервуар всех компонентов по предварительно установленной рецептуре делается анализ проб. В случае если продукт в резервуаре не соответствует спецификациям или имеется слишком большое его количество по сравнению со спецификациями с целью коррекции качества, делается корректировка рецептуры.

Данная операция требует много времени и не позволяет проводить коррекцию смеси во время процесса смешения, так как качественные параметры конечного продукта можно получить только после подачи в резервуар всех компонентов и их надлежащего смешивания. Система поточного смешения предполагает предварительный расчет расходов компонентов смеси. Операция смешения проводится в соответствии с заранее определенными расходами.

Автономный оптимизатор смешения может применяться для определения рецептуры (на базе качественных показателей продукта, качества компонентов и ограничений расходов компонентов). Оптимизатор также рассчитывает ограничения аппаратуры и уровни заполнения резервуаров. Это означает, что оптимальное решение гарантирует производство смеси в имеющихся объемах компонентов в резервуарах и в соответствии с наблюдаемым потоком в резервуары компонентов. Пользователь также может установить ограничение соотношения компонентов напрямую. Например, подать как минимум 2 % н-бутана, или максимум 30 % риформата. В процессе смешения будет получено точное значение качественных показателей в резервуаре конечного продукта.

Компоненты: продукты риформинга, продукты изомеризации, изопентан, бензины каткрекинга, алкилбензины, н-С₄, октаноповышающая добавка МТБЭ.

Качественные параметры компонентов смеси вводятся вместе со спецификациями конечных продуктов, и делается расчет с целью определения наиболее экономичной рецептуры смеси (например, максимальное вовлечение риформатов). Данные расчеты могут быть проведены для всех сортов продукта для зимних и летних качественных параметров.

7.8. Решение задач многоцелевой оптимизации (Парето-оптимизация)

Очевидно, что проводя оптимизацию, желательно улучшить такие характеристики производственного процесса, как надежность, простоту изготовления и обслуживания. В то же время, требуется соблюдать нормы на сырье, расход электроэнергии, вспомогательных материалов, обеспечить экологические нормы. При этом необходимо выпустить требуемое количество продукции заданного качества. Достижению одновременно всех требований препятствует объективно существующая взаимосвязь явлений в процессах и аппаратах химической технологии, а также ограничения на возможность варьирования оптимизируемыми параметрами системы. Таким образом, исследователь, решая задачу оптимизации, преследует много целей, рассматривает одновременно много объектов, использует много критериев. Такая оптимизация является многоцелевой, мультиобъектной, многокритериальной. Чаще всего многоцелевую оптимизацию пытаются свести к одноцелевой, что приводит к искажению существа проблемы. Степень близости к каждой из поставленных целей характеризуется критерием эффективности. Критерий эффективности – это числовая, функциональная характеристика системы, оценивающая степень приспособленности ХТС к решению поставленных перед ней задач. Проблемы выбора между альтернативными вариантами не существует, если один из них лучше другого по всем рассматриваемым показателям (частным составляющим критерия). Но конкурирующие варианты потому и являются конкурирующими, что один из них превосходит другой по одним показателям и уступает ему по другим. Возникает проблема оценки степени важности показателей. Естественно, всякая сложная система состоит из отдельных более простых подсистем (элементов). Следовательно, решая задачу многокритериальной оптимизации для системы в целом, необходимо в первую очередь решить задачу многоцелевой оптимизации для элементов.

При этом должна осуществляться координация этих задач. Проблема нахождения наилучших (оптимальных) решений при разработке новых и совершенствовании действующих производств обеспечивает его технико-экономическую эффективность.

7.9. Описание алгоритма оптимизации процесса компаундирования

В процессе оптимизации приходится иметь дело со многими противоречивыми требованиями к выпуску продукта. Значения одних показателей необходимо увеличить, а других в то же время уменьшить. Проблема осложняется и тем, что эти показатели не являются независимыми. Они взаимосвязаны, взаимообусловлены и повышение одних показателей приводит к понижению других. Поиск оптимального решения связан с нахождением разумного компромисса в условиях предъявленных противоречивых требований. Для этого используются схемы компромиссов на основе принципа равномерности. В этом случае решение находится в результате равномерного повышения качества оптимизируемого объекта по всем частным нормированным критериям. Этот принцип имеет три разновидности: равенство нормированных частных критериев, квазиравенство и справедливая уступка. Справедливым считается такой компромисс, при котором суммарный уровень снижения по одним показателям не превосходит суммарного уровня повышения по другим показателям. Пусть $\psi_i(x)$ в порядке убывания их важности или значения. Пусть каждый из них нужно минимизировать. Процедура поиска компромиссного решения состоит в следующем. Сначала ищется решение, обращающее ψ_1 в минимум. Затем назначается уступка $d\psi_1$, которую можно допустить, чтобы обратить в минимум ψ_2 . Налагаем на ψ_1 ограничение $(\psi_1(x) - d\psi_1)$ и ищем решение, обращающее в минимум ψ_2 . Затем назначается уступка для всех ψ_i и т. д. На компаундирование направляются потоки с установок как первичной, так и вторичной переработки нефти. В общем случае наиболее значимыми компонентами являются риформаты, бензины каткрекинга, алкилаты, изомеризаты и МТБЭ. В зависимости от производственных мощностей установок вырабатываются 92, 95 и 98 бензины. Алгоритм оптимизации состоит из двух основных блоков: блок расчета детонационной стойкости как отдельных потоков, так и их смеси с присадками и добавками, и блок расчета оптимального соотношения компонентов, для достижения заданного значения октанового числа бензина на основе оптимизации по Парето.

С экономической точки зрения оптимальной является схема смешения, которая удовлетворяет следующим условиям:

1. Максимальное использование ресурсов.
2. Максимальное использование риформатов, т. к. установки риформинга одновременно являются производственными мощностями для водорода, который необходим в процессах гидроочистки как бензинов, так и дизельных фракций.

Таблица 5

Частные составляющие критерия эффективности

Частный критерий	Наименование	Значение
ψ_1	Выход бензина, т	max
ψ_2	Расход риформата, т	max
ψ_3	Содержание бензола, %	1 max
ψ_4	Сера, ppm	10 max
ψ_5	ИОЧ	80, 92, 95, 98
ψ_6	Ароматические углеводороды, %	35 max
ψ_7	Олефины, %	17 max
ψ_8	ДНП, КПа	50...100

Таким образом, оптимизируемыми параметрами \vec{X} являются расходы потоков на компаундирования. По требованиям ГОСТа бензины одновременно должны удовлетворять следующим частным составляющим критерия. Пространство критериев представляется вектором $\psi_i(\vec{X})$, каждая частная составляющая которого представлена выходом бензина или его качеством. Изменяя оптимизируемые параметры, представленные компонентами вектора \vec{X} , мы будем изменять значения всех частных критериев. Цель многокритериальной оптимизации – определить такие значения $\vec{X}_1, \vec{X}_2, \dots, \vec{X}_{12}$, обеспечивающие требуемые значения $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_8$. Частные критерии противоречат друг другу, поэтому решение должно быть компромиссным. Для поиска компромиссного решения вводится понятие идеального значения по всем частным составляющим ψ_i . Тогда критерий эффективности запишется следующим образом:

$$\psi = \left(1 - \frac{\psi_i}{\psi_{i, \text{идеал.}}} \right)^2 \rightarrow \min.$$

Поскольку требования стандартов вводят ограничения на содержание отдельных компонентов в бензинах различных марок, например бензола, суммы ароматических или олефиновых углеводородов, тогда

определение общего критерия оптимальности по Парето для процесса компаундирования:

$$\begin{aligned} \psi = & \left(1 - \frac{\Psi_1}{\Psi_{1, \text{идеал}}}\right)^2 + \left(1 - \frac{\Psi_2}{\Psi_{2, \text{идеал}}}\right)^2 + \left(1 - \frac{\Psi_3}{\Psi_{3, \text{идеал}}}\right)^2 + \left(1 - \frac{\Psi_4}{\Psi_{4, \text{идеал}}}\right)^2 + \\ & + \left(1 - \frac{\Psi_5}{\Psi_{5, \text{идеал}}}\right)^2 + \left(1 - \frac{\Psi_6}{\Psi_{6, \text{идеал}}}\right)^2 + \left(1 - \frac{\Psi_7}{\Psi_{7, \text{идеал}}}\right)^2 + \left(1 - \frac{\Psi_8}{\Psi_{8, \text{идеал}}}\right)^2, \end{aligned} \quad (61)$$

где Ψ_1 – выход бензина, т; Ψ_2 – расход риформата, т; Ψ_3 – содержание бензола, %; Ψ_4 – сера, ppm; Ψ_5 – ИОЧ; Ψ_6 – ароматические углеводороды, %; Ψ_7 – олефины, %; Ψ_8 – ДНП, КПа.

Значения оптимизируемых параметров $\bar{X}_1, \bar{X}_2, \dots, \bar{X}_{12}$, обеспечивающие $\min \psi_i$, будут являться компромиссными. Для нахождения компромиссного решения с использованием принципа равномерности решение находится в результате равномерного изменения всех составляющих ψ_i . Если допустить квазиравенство для всех частных составляющих, то значения критериев отличаются не более, чем на наперед заданное число eps. Если решение не удовлетворяет требованиям к выпускаемым бензинам, то делается уступка в схеме компромиссов. В таблице все критерии ранжированы по их значимости. Процедура оптимизации для поиска компромиссного решения, наилучшим образом отвечающего технико-экономическим требованиям, заключается в следующем: сначала ищется решение по ψ_1 (объем производства) и определяются значения оптимизируемых параметров, обращающие в минимум ψ_1 , то есть все потоки суммируются. Затем назначается уступка по ψ_1 – $d\psi_1$, которую можно допустить, чтобы обратить в минимум ψ_2 . Если не выполнено условие по сере, снижается расход бензина каткрекинга с одновременным снижением объема выпуска бензина. Далее проводится аналогичный анализ других составляющих критерия эффективности. На последней стадии поиска компромисса регулируется ИОЧ расходами алкилбензина и МТБЭ. В результате будет выполнено условие минимума критерия эффективности при ограничениях, которые создают уступки.

Также программа позволяет создавать правила, которые должны быть выполнены при расчете оптимальных соотношений потоков. Программа позволяет проводить варьирование содержания присадок в заданном интервале и оценивать их влияние на прирост октанового числа как отдельных потоков, так и их смесей, представляя результаты при этом в удобной для пользователя форме.

Также с использованием разработанной моделирующей системы были выработаны рецептуры смешения бензинов различных марок с учётом динамики изменения состава риформатов, соответствующие

всем требованиям Технологического регламента (табл. 4). Рецептуры рассчитаны с вовлечением в процесс компаундирования изомеризата, алкилата и риформатов (наиболее отличающихся по составу), н-бутана и изопентана, а также оксигената МТБЭ.

Разработка рецептуры проводится с учётом вовлечения максимального количества наиболее дешёвого и наиболее используемого базового компонента бензина – риформата и минимального вовлечения наиболее дорогостоящих компонентов – алкилбензинов и оксигенатов. Таким образом, предложен подход к оптимизации процесса компаундирования на основе сравнения плановых и фактических рецептур смешения. Приведены основные рекомендации повышению октанового числа продукта, снижению излишнего запаса по октановому числу и дорогостоящим компонентам топлив.

Для проведения полного качественного и количественного анализа эффективности процесса смешения необходимо видеть взаимосвязь между производствами и режимами работы установок, их влияние на производительность процесса компаундирования. В таком случае рекомендации по изменению рецептур целью повышения эффективности стадии смешения будут корректны и полностью обоснованы.

7.10. Календарное планирование производства бензинов на основе планов Aspen Pims

Разработанная система оптимального календарного планирования производства высокооктановых бензинов для расчета, оптимизации и прогнозирования производства бензинов с учетом требований к выпускаемым бензинам и всех компонентных составляющих бензинового пула в качестве исходных данных использует плановые показатели выпуска. План выработки компонентов смешения представлен в табл. 6.

План выработки товарных бензинов марок Нормаль 80, Регуляр 92, Премиум 95 и Супер 98, в соответствии с расчётами в системе Aspen Pims, представлен в табл. 7.

С использованием интеллектуальной системы «Compounding» были рассчитаны оптимальные рецептуры приготовления товарных бензинов с учётом качества и количества компонентов смешения. Результаты расчётов представлены в табл. 8. Расчётные свойства товарных бензинов представлены в табл. 9.

Расчётные свойства бензинов соответствуют всем предъявляемым требованиям к качеству товарных бензинов.

С использованием компьютерной моделирующей системы приготовления бензинов «Compounding» рассчитан суточный план выработки

в рамках расчётного периода программы Aspen Pims. Результаты расчётов представлены в табл. 10.

Таблица 6

Выработка компонентов согласно плану Aspen Pims

Период	1-4 октября 2014 г.
Поток	Количество, тонн
<i>Бензин риформинга 35-11/1000</i>	8196
<i>Толуольный концентрат</i>	1791
<i>Бензин КТ-1/1</i>	4391
<i>Бензин г/о БКК</i>	14 717
<i>МТБЭ</i>	574
<i>Алкилбензин</i>	2565
<i>Смесь изопентана</i>	3100
<i>Изомеризат</i>	2122
<i>См. бензинов газовых.</i>	1418
<i>См. бензинов прямогонных</i>	953
<i>Бензин 35/11-600</i>	3569

Таблица 7

План выработки товарных бензинов различных марок (данные Pims)

Марка бензина	Количество, тонн
<i>Нормаль 80</i>	1705
<i>Регуляр 92</i>	23 790
<i>Премиум 95</i>	5004
<i>Супер 98</i>	601

Таблица 8

Расчётные рецептуры приготовления товарных бензинов («Compounding»)

Поток	Степень вовлечения, % мас.			
	<i>Нормаль 80</i>	<i>Регуляр 92</i>	<i>Премиум 95</i>	<i>Супер 98</i>
<i>ГО БКК</i>	49,24	31,74	26,88	10,49
<i>Крекинг КТ-1</i>	8,44	13,46	13,17	11,05
<i>Риформат Л-35-11-1000</i>	0,00	22,02	20,92	22,28
<i>Риформат Л-35-11-600</i>	11,90	7,69	7,09	7,90
<i>Толуол концентрат</i>	0,00	0,00	2,73	5,08
<i>Изомеризат Изомалк-2</i>	0,03	6,49	5,88	11,00
<i>Изопентан</i>	1,39	8,07	5,09	11,53
<i>Алкилбензин</i>	0,00	7,32	10,18	13,48
<i>МТБЕ</i>	0,00	0,00	5,57	7,17
<i>Смесь бензинов прямогонных</i>	29,01	3,06	2,49	0,00
Итого	100	100	100	100

Таблица 9

Расчётные свойства товарных бензинов («Compounding»)

<i>Параметр</i>	<i>Нормаль 80</i>	<i>Регуляр 92</i>	<i>Премиум 95</i>	<i>Супер 98</i>
ОЧИ	80,00	92,00	95,00	98,00
ОЧМ	73,00	85,00	87,00	91,00
ДНП, кПа	47,53	56,46	52,15	57,00
Содержание бензола, % мас.	0,83	0,98	0,89	0,79
Содержание ароматики, % мас.	22,84	35,96	35,05	34,36
Содержание олефинов, % мас.	15,04	11,23	9,84	5,01
Содержание серы, % мас.	0,0009	0,001	0,0009	0,0007

Таблица 10

План производства бензинов различных марок в период 1–4 октября
(моделирующая система «Compounding»)

Период	Производство бензина, тонн			
	<i>Нормаль 80</i>	<i>Регуляр 92</i>	<i>Премиум 95</i>	<i>Супер 98</i>
1 октября	700	4300	2004	–
2 октября	–	13 790	–	421
3 октября	–	–	2538	180
4 октября	1005	5700	462	–
Итого	1705	23 790	5004	601

Количество компонентов, не вовлечённых в процесс производства товарных бензинов, рассчитывается как разница между объёмом выработки компонента за данный период и используемым объёмом компонентов, используемым в процессе смешения.

Таблица 11

Компоненты, не вовлечённые в производство бензинов

<i>Поток</i>	<i>Количество, тонн</i>	
	Система «Compounding»	Aspen Pims
ГО БКК	4838	2354
Крекинг КТ-1	404	2037
Риформат Л-35-11-1000	1776	2887
Риформат Л-35-11-600	1122	1416
Толуол концентрат	1624	1791
Изомеризат Изомалк-2	218	1822
Изопентан	833	416
Алкилбензин	233	666
МТБЭ	252	0
Смесь бензинов прямогонных	1033	1285

Количество компонентов, не вовлечённых в производство бензинов по плану Pims и в соответствии с расчётами в системе «Compounding» представлено в табл. 12. Таким образом, по результатам проведённых расчётов, степень вовлечения риформата, а также бензинов крекинга КТ-1 в приготвление товарных бензинов увеличивается при неизменном объёме выпуска товарной продукции.

Таблица 12

*Частные составляющие критерия эффективности
для двух вариантов планирования*

Частный критерий	Наименование	Система «Compounding»	Aspen Pims
ψ_1	Выход бензина, т	0,000	0,000
ψ_2	Расход риформата, т	0,595	0,695
ψ_3	Содержание бензола, %	0,086	0,060
ψ_4	Сера, ppm	0,772	0,998
ψ_5	ИОЧ	0,000	0,000
ψ_6	Аром. углеводороды, %	0,121	0,125
ψ_7	Олефины, %	0,803	0,806
ψ_8	ДНП, КПа	0,041	0,066
$\psi_{\text{общ}}$	Общий критерий	2,418	2,750

По методике, описанной ранее, критерий эффективности для варианта планирования выпуска товарной продукции, рассчитанного с использованием системы «Compounding», ниже критерия, характерного для варианта планирования программы Aspen Pims, что соответствует лучшему уровню оптимизации.

Применение системы «Compounding» при планировании производства товарных бензинов позволяет снизить процент вовлечения дорогостоящих компонентов (МТБЭ, изопентан) за счёт увеличения доли риформата и бензина каталитического крекинга (КТ-1) в составе товарных бензинов, что позволяет достичь экономической эффективности процесса компаундирования.

Для определения объема и качества добавляемых потоков к некондиционному объёму продукции для выполнения требований, предъявляемых конечному товарному бензину, требуется создание программной связки с базами данных завода специалистами АСУ ТП. Выбор компонентного резервуара (из которого происходит забор компонента бензина) и товарного резервуара (в который происходит налив готовой продукции) также связан с участием специалистов АСУ ТП завода, так

как подключение к базам данных без их участия невозможно. Расширение списка резервуаров и потоков компонентов бензинов так же требует привязки к конкретным полям из базы данных завода и не может быть осуществлена без участия специалистов АСУ ТП завода.

Контрольные вопросы по разделу

1. Основные этапы системного анализа при оптимизации химических производств по технологическим, экономическим и экологическим критериям.
2. Какие условия необходимо учитывать при составлении целевой функции?
3. В чем отличие выходных, входных и внутренних параметров ХТС?
4. Что собой представляют критерии для системного анализа производственных процессов?
5. Какие критерии эффективности встречаются на практике?
6. Перечислите задачи многокритериального анализа химических производств.
7. Что такое компромиссное решение при оптимизации химических производств?
8. Какие Вы знаете методы решения задач многокритериального анализа?

8. СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ ТОПЛИВА И ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ

Системный анализ процессов химической технология топлива и высокоэнергетических веществ представляет взаимосвязь фундаментальных и прикладных исследований в области химии и технологий переработки в основном жидких и газообразных топлив, в том числе нефти, нефтепродуктов, газовых конденсатов, газа, сланцев; процессов синтеза специальных продуктов с повышенной эффективностью действия и эксплуатационной надежностью.

Области исследований:

1. Системный анализ общих научных основ и закономерностей физико-химической технологии нефти и газа, молекулярного строения нефти и нефтяных систем, физико-химической механики нефтяных дисперсных систем, их свойств и методов исследования.

2. Системный анализ технологии и схем процессов переработки нефтяного сырья на компоненты, конструктивного оформления технологий и основных показателей аппаратуры установок для переработки сырья, энергосберегающие технологий, технологий приготовления товарных нефтепродуктов.

3. Системный анализ приготовления катализаторов и каталитических процессов переработки углеводородного сырья.

4. Системный анализ подготовки продуктов переработки нефти и газа для нефтехимического синтеза.

5. Системный анализ химмотологических аспектов физико-химической технологии нефти и газа.

6. Системный анализ научных основ и закономерностей физико-химической технологии синтеза специальных продуктов, новых технологий производства специальных продуктов.

7. Системный анализ экологических аспектов переработки топлив, технических и технологических средств и способов защиты окружающей среды от вредных выбросов производств по переработке топлив.

Метод системного анализа – метод математического моделирования.

Математические модели – основа для интеграции всех знаний о процессе производства топлив и высокоэнергетических веществ.

Математическое моделирование как наука опирается на оптимальное соотношение экспериментальных данных и вычислительных. Такой подход состоит в последовательности циклов, где каждый очередной

цикл приближает к решению поставленной задачи. Цикл начинается с предварительного построения модели на основе всей известной о процессе производства топлив и высокоэнергетических веществ. Затем разрабатываются алгоритмы и программы и проводится численный анализ протекания процесса на математической модели. На основе полученных результатов планируется следующий эксперимент. Каждое последующее измерение выполняется после выполнения и анализа предыдущего в реальном времени. Такой подход усиливает вклад интеллектуальной деятельности в конечный результат и снижает число опытов при повышении качества. Прямые измерения отражают только отдельные факты, а полная картина содержится в математической, построенной на стыке наук: химии, математики, физики и информатики.

Циклы эмпирических и вычислительных экспериментов позволяют создать последовательность математических моделей, описывающих экспериментальные данные с различной степенью формализации и адекватности эксперименту.

При этом выясняются прогностические свойства моделей в тех диапазонах параметров, где проведение эксперимента затруднительно или невозможно. Новые оригинальные результаты, полученные на модели, стимулируют дальнейшее развитие этих исследований. Наглядность процессов производства топлив и высокоэнергетических веществ исчезает без моделей. Многие явления не доступны для изучения, и моделирование расширяет возможности для исследований, позволяя, например, описать реакционную способность превращения углеводородов на различных промышленных катализаторах (задача тестирования катализаторов), решить обратную кинетическую задачу и определить численные значения констант скоростей реакций, прогнозировать длительность межрегенерационного цикла и общего срока службы катализатора, решить задачу снижения коксообразования на поверхности катализатора оптимальной подачей промоторов в реакционную зону, совершенствовать конструкцию реакторов и других аппаратов ХТС.

Кинетические закономерности являются основой количественной характеристики избирательности и активности катализатора.

Кинетическая модель строится на основе результатов термодинамического анализа, который выявляет механизм и особенности протекания химических реакций. К ним относятся: обратимость и равновесность стадий, характер заполнения поверхности реагирующими веществами, нестационарность режимов и причины дезактивации катализатора.

9. ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ

Лабораторный практикум включает в себя четыре основные темы, по которым студенты получают практические навыки по применению стратегии системного анализа процессов и аппаратов химической технологии посредством программной реализации математических моделей и моделей для представления знаний. Программная реализация выполнена в интегрированной среде объектно ориентированного программирования Pascal ABC и Delphi.

Лабораторная работа № 1.

Системный анализ процесса компаундирования товарных бензинов

Цель работы:

1. Ознакомиться с процессом приготовления товарных бензинов.
2. Составить программу среде программирования Pascal ABC и Delphi для расчета:
 - октанового числа товарного бензина при смешении двух потоков;
 - доли потоков для приготовления требуемой марки бензина.

Исходные данные:

1. Рассчитать октановое число смешиваемых потоков и товарного бензина при смешении двух потоков:

Название потока	Доля
АИ-92	0,7
АИ-98	0,3

2. Рассчитать доли потоков для приготовления бензина с октановым числом 95.

Углеводородный состав потоков приведен в табл. 2, а основной теоретический материал и расчетные формулы представлены в разделе 1.3 данного учебного пособия.

Пример решения поставленной задачи в среде программирования Delphi приведен на рис. 32.

Системный анализ процесса компаудирования

Данные Расчет

Расчет ОЧ при смешении потоков Рафинат и АИ 92

Доля потока АИ-92 Доля потока АИ 98

0.7 0.3

№	Название	ОЧ(ИМ)ком	АИ-92	АИ 98
1	Пропан	100	0.09	0.01
2	Бутан	93.6	1.32	0.51
3	Пентан	61.7	5.19	1.39
4	Н-гексан	24.8	3.34	1.78
5	Н-гептан	0	2.73	2.9
6	Н-октан	-19	0.63	0.44
7	Н-нонан	-39	0.21	0.29

ОЧ потока Рафинат ОЧ потока АИ 92 ОЧ при смешении потоков

89.8 98.24 92.33

Расчет долей потоков для получения требуемого ОЧ

Требуемое ОЧ

95

Необходимо смешать потоки в следующих пропорциях

Доля потока АИ-92 Доля потока АИ 98

0.38 0.62

Рис. 32. Главное окно программы для компаудирования двух потоков

Программный код для решения поставленной задачи:

unit Unit1;

interface

uses

Windows, Messages, SysUtils, Variants, Classes, Graphics, Controls,
Forms,

Dialogs, Menus, Grids, StdCtrls, Math;

type

TForm1 = **class**(TForm)

SG1: TStringGrid;

MainMenu1: TMainMenu;

N1: TMenuItem;

N2: TMenuItem;

Label1: TLabel;

Edit1: TEdit;


```

Label2: TLabel;
Edit2: TEdit;
Label3: TLabel;
Label4: TLabel;
Label5: TLabel;
Edit5: TEdit;
Label6: TLabel;
Label7: TLabel;
Label8: TLabel;
Label9: TLabel;
N3: TMenuItem;
N4: TMenuItem;
N5: TMenuItem;
Edit3: TEdit;
Label10: TLabel;
Label11: TLabel;
Edit4: TEdit;
Edit6: TEdit;
Edit7: TEdit;
Edit8: TEdit;
procedure FormCreate(Sender: TObject);
procedure N2Click(Sender: TObject);
procedure N4Click(Sender: TObject);
procedure N5Click(Sender: TObject);
procedure Edit1KeyPress(Sender: TObject; var Key: Char);
procedure Edit2KeyPress(Sender: TObject; var Key: Char);
procedure Edit6KeyPress(Sender: TObject; var Key: Char);
procedure Edit3KeyPress(Sender: TObject; var Key: Char);
procedure Edit4KeyPress(Sender: TObject; var Key: Char);
procedure Edit5KeyPress(Sender: TObject; var Key: Char);
private
    { Private declarations }
public
    { Public declarations }
end;

var
    Form1: TForm1;
    CompTitle: array [1..64] of string;
    ON,C1,C2: array [1..64] of real;
    ONflow,a1,a2,ONflow1,ONflow2,ONmix,ONmix1,a11,a22: real;

```

f1,f2:textfile;

implementation

{ \$R *.dfm }

//Подпрограмма-функция для расчета ОЧ потоков

function OctNum(ONi,Ci:array of real):real;

var i:integer;

begin

ONflow:=0;

for i:=1 to 64 **do**

begin

ONflow:=ONflow+(ci[i]/100)*ONi[i];

end;

OctNum:=ONflow;

end;

//Заполнение ячеек таблицы с исходными данными

procedure TForm1.FormCreate(Sender: TObject);

var

i:integer;

begin

AssignFile(f1,ExtractFilePath(Application.Exename)+'\Title.txt');

Reset(f1);

for i:=1 to 64 **do**

begin

SG1.Cells[0,i]:=IntToStr(i);

readln(f1,CompTitle[i]);

SG1.Cells[1,i]:=CompTitle[i];

end;

CloseFile(f1);

SG1.Cells[0,0]:='№';

SG1.Cells[1,0]:='Название';

SG1.Cells[2,0]:='ОЧ(ИМ) компонентов';

SG1.Cells[3,0]:='АИ-92';

SG1.Cells[4,0]:='АИ-98';

SG1.Colwidths[0]:=30;

SG1.Colwidths[1]:=180;

SG1.Colwidths[2]:=120;

```
for i:=1 to 64 do
begin
  SG1.Cells[2,i]:='-';
  SG1.Cells[3,i]:='-';
  SG1.Cells[4,i]:='-';
  SG1.Cells[5,i]:='-';
end;
end;

//Считывание исходных данных (ОЧ компонента, содержание компо-
нентов в 1 и 2 потоке)
procedure TForm1.N2Click(Sender: TObject);
var
i:integer;
begin
  AssignFile(f2,ExtractFilePath(Application.Exename)+'\dan.txt');
  Reset(f2);
  for i:=1 to 64 do
  begin
    readln(f2,ON[i],C1[i],C2[i]);
    SG1.Cells[2,i]:=FloatToStr(ON[i]);
    SG1.Cells[3,i]:=FloatToStr(C1[i]);
    SG1.Cells[4,i]:=FloatToStr(C2[i]);
  end;
  CloseFile(f2);
end;

//Расчет ОЧ потоков и ОЧ смеси
procedure TForm1.N4Click(Sender: TObject);
label m1,m2,m3;
var i:integer;
begin
  if (Edit1.Text='') or (Edit2.Text='') then goto m2;
  if (StrToFloat(Edit1.Text)+StrToFloat(Edit2.Text))<>1 then goto m2;
  for i:=1 to 64 do
  begin
    if (SG1.Cells[3,i]='-') or (SG1.Cells[4,i]='-') then goto m3;
  end;
  a1:=StrToFloat(Edit1.Text);
  a2:=StrToFloat(Edit2.Text);
```

```
ONflow1:=OctNum(ON,C1); Edit3.Text:=FloatToStr(RoundTo(ONflow1,-2));  
ONflow2:=OctNum(ON,C2); Edit4.Text:=FloatToStr(RoundTo(ONflow2,-2));  
ONmix:=a1*OctNum(ON,C1)+a2*OctNum(ON,C2);  
Edit5.Text:=FloatToStr(RoundTo(ONmix,-2));  
ShowMessage('Расчет выполнен'); Exit;  
m2: ShowMessage('Неверно указаны доли потоков'); Exit;  
m3: ShowMessage('Загрузите или введите ОЧ компонентов и составы потоков'); Exit;  
end;
```

// Расчет долей потоков при смешении для получения требуемого ОЧ

```
procedure TForm1.N5Click(Sender: TObject);  
label m1,m2;  
var i:integer;  
begin  
  ONmix1:=StrToFloat(Edit6.Text);  
  if (Edit6.Text='-') then goto m2 else  
    a11:=(ONmix1-ONflow2)/(ONflow1-ONflow2);  
    a22:=1-a11;  
    Edit7.Text:=FloatToStr(RoundTo(a11,-2));  
    Edit8.Text:=FloatToStr(RoundTo(a22,-2));  
    ShowMessage('Расчет выполнен'); Exit;  
    m2: ShowMessage('Введите требуемое ОЧ'); Exit;  
end;
```

// Перечисление символов, которые можно вводить в Edit (цифры, разделитель дробной части)

```
procedure TForm1.Edit1KeyPress(Sender: TObject; var Key: Char);  
begin  
  if not (Key in ['0'..'9', DecimalSeparator, #8]) then Key:=#0;  
end;
```

```
procedure TForm1.Edit2KeyPress(Sender: TObject; var Key: Char);  
begin  
  if not (Key in ['0'..'9', DecimalSeparator, #8]) then Key:=#0;  
end;
```

```
procedure TForm1.Edit3KeyPress(Sender: TObject; var Key: Char);  
begin
```

```
if not (Key in ['0'..'9', DecimalSeparator, #8]) then Key:=#0;  
end;
```

```
procedure TForm1.Edit4KeyPress(Sender: TObject; var Key: Char);  
begin  
if not (Key in ['0'..'9', DecimalSeparator, #8]) then Key:=#0;  
end;
```

```
procedure TForm1.Edit5KeyPress(Sender: TObject; var Key: Char);  
begin  
if not (Key in ['0'..'9', DecimalSeparator, #8]) then Key:=#0;  
end;
```

```
procedure TForm1.Edit6KeyPress(Sender: TObject; var Key: Char);  
begin  
if not (Key in ['0'..'9', DecimalSeparator, #8]) then Key:=#0;  
end;
```

```
end.
```

Лабораторная работа № 2. Модульный принцип расчета ХТС

Цель работы – освоение методики составления и использования моделирующих программ для расчета химико-технологических систем, построение подпрограмм для расчета смесителя, распределителя потоков и теплообменника.

Исходные данные:

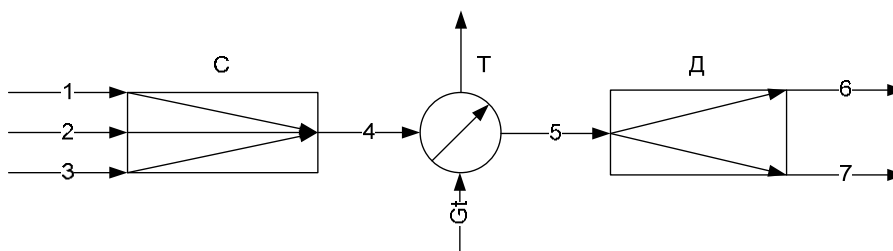


Рис. 33. Схема ХТС 1

1. Исходные данные для расчета смесителя

№ потока	Расход, кг/ч	Температура, К	Доля компонента	
			1	2
1	2160	298	0,5	0,5
2	2000	320	0,2	0,8
3	2100	301	0,4	0,6

2. Исходные данные для расчета теплообменника

Параметры теплообменника	
Внутренний диаметр труб, м	0,050
Внешний диаметр труб, м	0,057
Количество труб	3280
Площадь сечения теплообмена, м ²	5,85
Термическое сопротивление стенки, м ² /Вт	0,127
Площадь теплообмена, м ²	3860
Теплоемкость горячего теплоносителя, кДж(кг·К)	0,920
Расход горячего теплоносителя, кг/ч	6200
Начальная температура горячего теплоносителя, К	360

3. Исходные данные для расчета делителя

Коэффициент разделения	
Поток 6	Поток 7
0,5	0,5

Задание:

1. Составить программу среде программирования Pascal ABC и Delphi для расчета ХТС 1 (рис. 33), а именно найти: расход, температуру, теплоемкость и состав (доли компонентов в потоке) каждого потока, записать матрицу потоков для ХТС 1.

2. Используя написанную программу рассчитать ХТС 2 (рис. 34), записать матрицу потоков для ХТС 2.

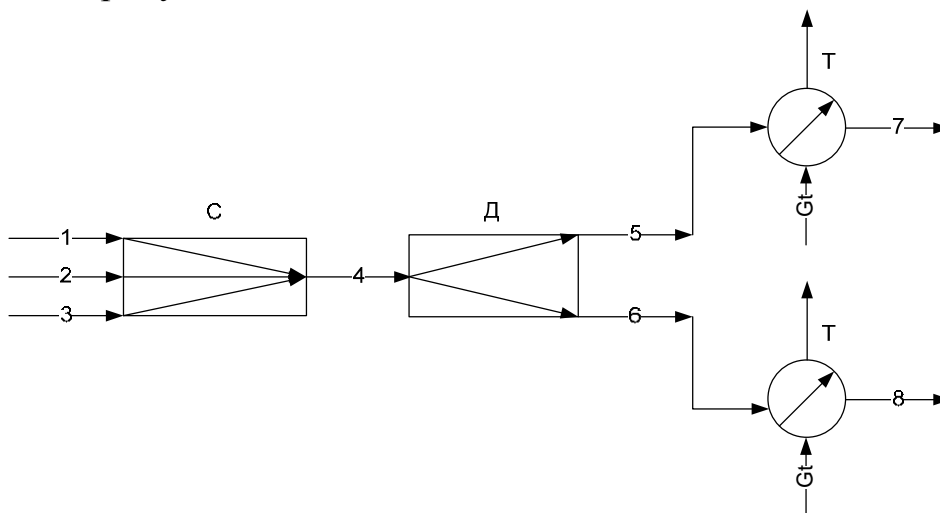


Рис. 34. Схема ХТС 2

Смеситель потоков

Одними из наиболее распространенных аппаратов в химической технологии являются смесители и распределители потоков. Достаточно сказать, что стоимость работ по технологическому проектированию гидравлического оборудования (трубопроводы, насосы, смесители и распределители потоков) составляют около 50 % стоимости работ по созданию технологического проекта химического и нефтехимического предприятия, а капитальные затраты на создание и монтаж гидравлического оборудования составляют более 50 % капитальных затрат на строительство всего химического и нефтехимического предприятия.

При разработке математической модели смесителя потоков сделаем следующие упрощающие допущения:

- имеет место идеальное перемешивание;
- тепловой эффект смешения не учитывается;
- тепловые потери отсутствуют;
- теплоёмкость веществ принимается постоянной.

Делая это допущение, необходимо иметь в виду, что теплоемкость зависит от температуры и давления, однако для газов практически не меняется. В случае необходимости величина теплоемкости может быть рассчитана по температуре, на основании эмпирической зависимости:

$$Cp = A + BT, \quad (62)$$

где T – температура, при которой определяется теплоёмкость, °C; A, B – эмпирические коэффициенты, экспериментально определенные для вещества.

Теплоемкость входных потоков, если между ними не происходит химическое взаимодействие, определяется по правилу аддитивности. При этом надо принимать во внимание, что теплоёмкость растворов с повышением их концентрации не подчиняется строго этому правилу. Однако для наших расчетов без особо грубой ошибки в пределах концентраций до 40...50 % теплоемкость раствора можно определить по правилу аддитивности, как это наблюдается в случае газовых смесей.

Математическое описание смесителя потоков с учетом допущений включает следующие уравнения:

- общее уравнение материального баланса

$$G^K = \sum_{i=1}^n G_i; \quad (63)$$

- уравнения материального баланса по каждому компоненту

$$G^K m_j^K = \sum_{i=1}^n (G_i m_{j,i}), \quad (64)$$

откуда

$$m_j^K = \frac{\sum_{i=1}^n (G_i m_{j,i})}{G^K}; \quad (65)$$

- уравнение теплового баланса

$$G^K Cp^K T^K = \sum_{i=1}^n (G_i Cp_i T_i), \quad (66)$$

откуда

$$T^K = \frac{\sum_{i=1}^n (G_i Cp_i T_i)}{G^K Cp^K}, \quad (67)$$

где

$$Cp_i = \sum_{j=1}^l (Cp_j m_{i,j}); \quad (68)$$

$$Cp^K = \sum_{j=1}^l (Cp_j m_j^K). \quad (69)$$

В приведённых уравнениях были приняты следующие обозначения:

$I = 1..n$; i – номер входного потока, n – количество входных потоков;

$J = 1..l$; j – номер вещества, l – количество веществ;

G^K – расход выходного потока, кг/ч;

G_i – расход i -го входного потока, кг/ч;

$m_{i,j}$ – мольная доля j -го вещества в i -ом входном потоке;

$m_{,j}^K$ – мольная доля j -го вещества в выходном потоке;

T_i – температура i -го входного потока, °С;

T^K – температура выходного потока, °С;

Cr^K , Cr_i – соответственно теплоёмкости выходного и i -го входного потока, Дж/(кг · К);

Cr_j – теплоёмкость j -го вещества, Дж/(кг · К).

Таким образом, последовательность расчета смесителя будет следующая:

1. По уравнению (63) рассчитываем общий расход G_4 .
2. По уравнению (65) рассчитываем доли компонентов в потоке G_4 .
3. По уравнениям (68) и (69) рассчитываем теплоёмкости входных и выходных потоков.
4. По уравнению (67) рассчитываем температуру потока G_4 .

Теплообменник

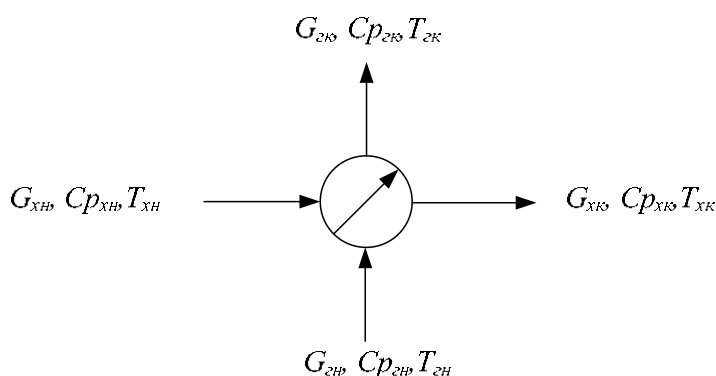


Рис. 35. Параметры, влияющие на эффективность теплообменника

При построении математического описания допустим, что рассматривается кожухотрубчатый теплообменник в стационарном режиме работы. При этом теплопередача не сопровождается изменением агрегатного состояния теплоносителей и потери теплоты не учитываются. Организована противоточная схема движения теплоносителей. Коэффициенты теплоотдачи в трубном и межтрубном пространствах будем рас-

считывать при начальных температурах теплоносителей. Теплоноситель, отдающий теплоту («горячий» поток), направляется в трубы, а теплоноситель, воспринимающий теплоту («холодный» поток), – в межтрубное пространство.

Поскольку теплообменник не изменяет состава материальных потоков, то

$$G_{ГК} = G_{ГН}, G_{ХК} = G_{ХН}, \quad (70)$$

где G – расход теплоносителя, кг/ч (г и х горячий и холодный потоки).

Количество теплоты, переданное через стенку, равно

$$Q = K_T F \frac{\Delta t_2 - \Delta t_1}{\ln(\Delta t_2 / \Delta t_1)}, \quad (71)$$

где K_T – коэффициент теплопередачи, Вт/м²; F – площадь поверхности теплообмена, м²; $\Delta t_2 = t_{ГН} - t_{ХК}$; $\Delta t_1 = t_{ГК} - t_{ХН}$.

Количество теплоты:

- отданное горячим теплоносителем: $Q = W_{Г}(t_{ГН} - t_{ГК})$;
- воспринятое холодным теплоносителем: $Q = W_{Х}(t_{ХК} - t_{ХН})$.

При этом водяные эквиваленты равны:

$$W_{Г} = G_{Г} C_{p_{Г}}, \quad (72)$$

$$W_{Х} = G_{Х} C_{p_{Х}}. \quad (73)$$

Уравнение теплового баланса теплообменника имеет вид:

$$W_{Г}(t_{ГН} - t_{ГК}) = W_{Х}(t_{ХК} - t_{ХН}). \quad (74)$$

Из уравнения (86) находим:

$$t_{ГК} = t_{ГН} - \frac{(t_{ХК} - t_{ХН})}{N}. \quad (75)$$

$$N = W_{Г} / W_{Х}$$

Поскольку мы пренебрегаем потерями теплоты, то

$$W_{Г}(t_{ГН} - t_{ГК}) = K_T F \frac{\Delta t_2 - \Delta t_1}{\ln(\Delta t_2 / \Delta t_1)}. \quad (76)$$

Подставив (75) в (76) и выполнив простейшие преобразования, получаем:

$$t_{ХК} = t_{ХН} + (t_{ГН} - t_{ХН}) N \frac{e^{(M(1-N))} - 1}{e^{(M(1-N))} - N}. \quad (77)$$

$$M = \frac{K_T \cdot F}{W_{Г}}$$

Коэффициент теплопередачи рассчитываем по формуле:

$$K_T = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_1} + \sum r_{ct} + \frac{1}{\alpha_2}}, \quad (78)$$

где α_1 и α_2 – коэффициенты теплоотдачи в трубном и межтрубном пространствах, Вт/м²; $\sum r_{ct}$ – сумма термических сопротивлений стенки, м²/Вт.

Коэффициенты теплоотдачи для некоторых газовых смесей можно рассчитывать по формулам

$$\alpha_1 = \frac{1}{d_{вн}} \frac{G_{гн}}{N_m d_{вн}}^{0,8} (3,43 + 2,71 \cdot 10^{-3} t_{гн});$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{D_n} \frac{G_{хн} D_n}{S}^{0,6} (3,483 + 7,27 \cdot 10^{-3} t_{хн}), \quad (79)$$

где $d_{вн}$, D_n – внутренний и наружный диаметры труб, м; N_m – число труб в теплообменнике; S – площадь поверхности межтрубного пространства, м².

Теплоёмкости потоков рассчитывают по формуле (62).

Таким образом, последовательность расчета теплообменника будет следующая:

1. По уравнению (68) рассчитываем теплоемкость потока G4.
2. По уравнениям (72)–(73) рассчитываем водяные эквиваленты для G4 и Gt.
3. По уравнениям (75) и (77) рассчитываем коэффициенты N и M.
4. По уравнению (77) рассчитываем температуру потока G5.

Распределитель потока

На производстве аппарат данного типа предназначен для распределения входящего в него потока на нескольким выходных потоков.

Потому как состав и температура каждого выходного потока совпадают с составом и температурой входного потока, математическое описание распределителя потока имеет следующий вид:

$$G_i^K = b_i G, \quad (80)$$

$$m_{i,j}^K = m_j, \quad (81)$$

$$T_i^K = T, \quad (82)$$

где i – номер выходного потока; j – номер вещества в потоке; G – расход входного потока, кг/ч; G_i^K – расход i -го выходного потока, кг/ч; m_j – мольная доля j -го вещества во входном потоке; $m_{i,j}^K$ – мольная доля j -го вещества в i -м выходном потоке; T_i^K – температура i -го выходного

потока, °C; b_i – коэффициент, определяющий отношение между i -ми выходным и входным потоками, при этом $\sum b_i = 1$; T – температура входного потока, °C.

Таким образом, последовательность расчета теплообменника будет следующая:

1. По уравнению (80) рассчитываем расходы потоков G6 и G7.
2. Температура и состав потоков G6 и G7 будут равны температуре и составу потока G5.

Пример решения поставленной задачи в среде программирования Delphi приведен на рис. 36.

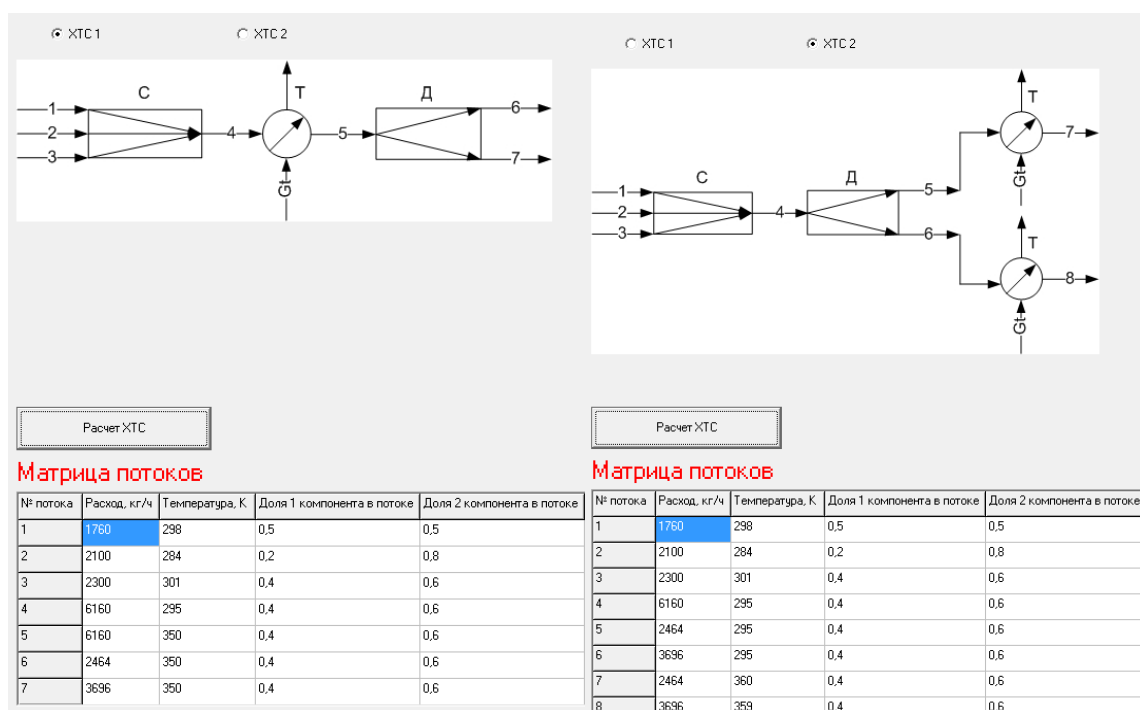


Рис. 36. Основное окно программы моделирования XTC постоянной и переменной структуры

Программный код для решения поставленной задачи:

unit Unit1;

interface

uses

Windows, Messages, SysUtils, Variants, Classes, Graphics, Controls, Forms,

Dialogs, StdCtrls, jpeg, ExtCtrls, Grids, Math;

type

```
TForm1 = class(TForm)
  RadioButton1: TRadioButton;
  RadioButton2: TRadioButton;
  Image1: TImage;
  Image2: TImage;
  Button1: TButton;
  FlowsMatrix: TStringGrid;
  Label1: TLabel;
  procedure RadioButton1Click(Sender: TObject);
  procedure RadioButton2Click(Sender: TObject);
  procedure FormCreate(Sender: TObject);
  procedure Button1Click(Sender: TObject);
private
  { Private declarations }
public
  { Public declarations }
end;
```

type

```
mas2=array [1..2] of real;
mas3=array [1..3] of real;
mas23=array[1..2,1..3] of real;
```

const

```
//Смеситель
Cp_comp_in:mas2=(0.872,0.966);
//Теплообменник
G_hot=6200;
Cp_hot=0.92;
Din=0.05; Nm=3280;
Dout=0.057; S=5.85; T_hot_in=360;
rw=0.127; F=3860;
//Делитель
b:mas2=(0.5,0.5);
```

var

```
Form1: TForm1;
i,j:integer;
f1,f2:text;
//Смеситель
G_mix_out,Cp_mix_out,T_mix_out:real;
m_mix_out:mas2;
```

```
G_mix_in,T_mix_in,Cp_mix_in:mas3;  
m_mix_in:mas23;  
//Теплообменник
```

```
G_heatex_in,T_heatex_in,Cp_heatex_in,W_hot,W_cold,N,a1,a2,Kt,M,G_hea  
tex_out,T_heatex_out,Cp_heatex_out:real;  
m_heatex_in,m_heatex_out:mas2;  
//Делитель  
m_sep_in,G_sep_out,m_sep_out:mas2;  
G_sep_in,T_sep_in,T_sep_out,Cp_sep_out:real;
```

implementation

```
{ $R *.dfm }  
// ---Процедура расчета смесителя---  
procedure Mixer(G_mix_in,T_mix_in,Cp_mix_in:mas3; m_mix_in:mas23);  
begin  
//Расход выходного потока после смешения, кг/ч  
G_mix_out:=0;  
for i:=1 to 3 do  
G_mix_out:=G_mix_out+G_mix_in[i];  
//Доля 1 и 2 вещества в выходном потоке после смешения  
for j:=1 to 2 do  
for i:=1 to 3 do  
m_mix_out[j]:=0;  
for j:=1 to 2 do  
for i:=1 to 3 do  
m_mix_out[j]:=m_mix_out[j]+(G_mix_in[i]*m_mix_in[j,i]/G_mix_out);  
//Теплоемкость 1,2,3 потоков, Дж/(кг*К)  
for j:=1 to 2 do  
for i:=1 to 3 do  
Cp_mix_in[i]:=0;  
  
for j:=1 to 2 do  
for i:=1 to 3 do  
Cp_mix_in[i]:=Cp_mix_in[i]+Cp_comp_in[j]*m_mix_in[j,i];  
  
//Теплоемкость выходного потока после смешения, Дж/(кг*К)  
Cp_mix_out:=0;  
for j:=1 to 2 do  
Cp_mix_out:=Cp_mix_out+Cp_comp_in[j]*m_mix_out[j];
```

```
//Температура выходного потока после смешения, К
T_mix_out:=0;
for i:=1 to 3 do
T_mix_out:=T_mix_out+(G_mix_in[i]*Cp_mix_in[i]*T_mix_in[i])/(G_mix_out*Cp_mix_out);
end;

// ---Процедура расчета теплообменника---
Procedure HeatExchanger(G_heatex_in,T_heatex_in,Cp_heatex_in:real;
m_heatex_in:mas2);
begin
//Водяной эквивалент горячего теплоносителя
W_hot:=G_hot*Cp_hot;
//Водяной эквивалент холодного теплоносителя
W_cold:=G_heatex_in*Cp_heatex_in;
//Коэффициент N
N:=W_hot/W_cold;
//Коэффициент теплоотдачи в трубном пространстве
a1:=(1/Din)*exp(0.8*ln(G_hot/(Nm*Din)))*(3.43+2.71e-3*T_hot_in);
//Коэффициент теплоотдачи в межтрубном пространстве
a2:=(1/Dout)*exp(0.6*ln(G_heatex_in*Dout/S))*(3.483+7.27e-3*T_heatex_in);
//Коэффициент теплопередачи
Kt:=1/((1/a1)+rw+(1/a2));
//Коэффициент M
M:=(Kt*F)/W_hot;
//Температура выходного потока из теплообменника
T_heatex_out:=T_heatex_in+(T_hot_in-T_heatex_in)*N*((exp(M*(1-N))-1)/(exp(M*(1-N))-N));
//Расход выходного потока из теплообменника
G_heatex_out:=G_heatex_in;

//Теплоемкость выходного потока из теплообменника
Cp_heatex_out:=Cp_heatex_in;
//Доли компонентов в выходном потоке из теплообменника
for i:=1 to 2 do
m_heatex_out[i]:=m_heatex_in[i];
end;

//---Процедура расчета делителя---
Procedure Separator(G_sep_in,T_sep_in,Cp_sep_in:real; m_sep_in:mas2);
```

```
begin
for i:=1 to 2 do
G_sep_out[i]:=0;
for i:=1 to 2 do
begin
//Расходы выходных потоков
G_sep_out[i]:=b[i]*G_sep_in;
//Доли компонентов в выходных потоках
m_sep_out[i]:=m_sep_in[i];
end;
//Температура выходных потоков из делителя
T_sep_out:=T_sep_in;
//Теплоемкость выходных потоков из делителя
Cp_sep_out:=Cp_sep_in;
end;

procedure TForm1.FormCreate(Sender: TObject);
var
i:integer;
begin
FlowsMatrix.ColWidths[0]:=60;
FlowsMatrix.ColWidths[1]:=72;
FlowsMatrix.ColWidths[2]:=90;
FlowsMatrix.ColWidths[3]:=155;
FlowsMatrix.ColWidths[4]:=155;
FlowsMatrix.Cells[0,0]:='№ потока';
FlowsMatrix.Cells[1,0]:='Расход, кг/ч';
FlowsMatrix.Cells[2,0]:='Температура, К';
FlowsMatrix.Cells[3,0]:='Доля 1 компонента в потоке';
FlowsMatrix.Cells[4,0]:='Доля 2 компонента в потоке';
for i:=1 to 7 do
FlowsMatrix.Cells[0,i]:=IntToStr(i);
end;

procedure TForm1.RadioButton1Click(Sender: TObject);
var
i,j:integer;
begin
Image1.Visible:=True;
Image2.Visible:=False;
FlowsMatrix.RowCount:=8;
```



```
FlowsMatrix.Height:=203;
Form1.Height:=607;
for i:=1 to 4 do
for j:=1 to 7 do
  FlowsMatrix.Cells[i,j]:='-';
end;

procedure TForm1.RadioButton2Click(Sender: TObject);
begin
  Image1.Visible:=False;
  Image2.Visible:=True;
  FlowsMatrix.RowCount:=9;
  FlowsMatrix.Height:=229;
  Form1.Height:=632;
  FlowsMatrix.Cells[0,8]:='8';
  for i:=1 to 4 do
  for j:=1 to 8 do
    FlowsMatrix.Cells[i,j]:='-';
  end;

procedure TForm1.Button1Click(Sender: TObject);
Label
M1,M2;
begin
  //Считываем входные параметры в ХТС (в смеситель)
  AssignFile(f1,'Mixer_dan1.txt');
  Reset(f1);
  for i:=1 to 3 do
    readln(f1,G_mix_in[i],T_mix_in[i]);
  CloseFile(f1);
  AssignFile(f2,'Mixer_dan2.txt');
  reset(f2);
  for j:=1 to 2 do
  for i:=1 to 3 do
    read(f2,m_mix_in[j,i]);
  CloseFile(f2);

  if Radiobutton1.Checked=True then
    begin
      FlowsMatrix.RowCount:=8;
      FlowsMatrix.Height:=203;
```

```
Form1.Height:=607;
//ХТС 1: смеситель-теплообменник-делитель
//Расчитываем ХТС последовательным расчетом ее элементов
Mixer(G_mix_in,T_mix_in,Cp_mix_in,m_mix_in);
HeatExchanger(G_mix_out,T_mix_out,Cp_mix_out,m_mix_out);
Separator(G_heatex_out,T_heatex_out,Cp_heatex_out,m_heatex_out);

//Вывод результатов расчета
//Поток 1
FlowsMatrix.Cells[1,1]:=FloatToStr(Round(G_mix_in[1]));
FlowsMatrix.Cells[2,1]:=FloatToStr(Round(T_mix_in[1]));
FlowsMatrix.Cells[3,1]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_in[1,1],-1));
FlowsMatrix.Cells[4,1]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_in[1,2],-1));

//Поток 2
FlowsMatrix.Cells[1,2]:=FloatToStr(Round(G_mix_in[2]));
FlowsMatrix.Cells[2,2]:=FloatToStr(Round(T_mix_in[2]));
FlowsMatrix.Cells[3,2]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_in[1,3],-1));
FlowsMatrix.Cells[4,2]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_in[2,1],-1));

//Поток 3
FlowsMatrix.Cells[1,3]:=FloatToStr(Round(G_mix_in[3]));
FlowsMatrix.Cells[2,3]:=FloatToStr(Round(T_mix_in[3]));
FlowsMatrix.Cells[3,3]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_in[2,2],-1));
FlowsMatrix.Cells[4,3]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_in[2,3],-1));

//Поток 4
FlowsMatrix.Cells[1,4]:=FloatToStr(Round(G_mix_out));
FlowsMatrix.Cells[2,4]:=FloatToStr(Round(T_mix_out));
FlowsMatrix.Cells[3,4]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_out[1],-1));
FlowsMatrix.Cells[4,4]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_out[2],-1));

//Поток 5
FlowsMatrix.Cells[1,5]:=FloatToStr(Round(G_heatex_out));
FlowsMatrix.Cells[2,5]:=FloatToStr(Round(T_heatex_out));
FlowsMatrix.Cells[3,5]:=FloatToStr(RoundTo(m_heatex_out[1],-1));
FlowsMatrix.Cells[4,5]:=FloatToStr(RoundTo(m_heatex_out[2],-1));

//Поток 6
FlowsMatrix.Cells[1,6]:=FloatToStr(Round(G_sep_out[1]));
FlowsMatrix.Cells[2,6]:=FloatToStr(Round(T_sep_out));
```

```
FlowsMatrix.Cells[3,6]:=FloatToStr(RoundTo(m_sep_out[1],-1));  
FlowsMatrix.Cells[4,6]:=FloatToStr(RoundTo(m_sep_out[2],-1));
```

```
//Поток 7
```

```
FlowsMatrix.Cells[1,7]:=FloatToStr(Round(G_sep_out[2]));  
FlowsMatrix.Cells[2,7]:=FloatToStr(Round(T_sep_out));  
FlowsMatrix.Cells[3,7]:=FloatToStr(RoundTo(m_sep_out[1],-1));  
FlowsMatrix.Cells[4,7]:=FloatToStr(RoundTo(m_sep_out[2],-1));  
end;
```

```
if Radiobutton2.Checked=True then
```

```
begin
```

```
FlowsMatrix.RowCount:=9;  
FlowsMatrix.Height:=229;  
Form1.Height:=632;  
FlowsMatrix.Cells[0,8]:='8';
```

```
//ХТС 2: смеситель-делитель-теплообменник-теплообменник
```

```
//Расчитываем ХТС последовательным расчетом ее элементов
```

```
Mixer(G_mix_in,T_mix_in,Cp_mix_in,m_mix_in);  
Separator(G_mix_out,T_mix_out,Cp_mix_out,m_mix_out);  
HeatExchanger(G_sep_out[1],T_sep_out,Cp_sep_out,m_sep_out);
```

```
//Поток 7
```

```
FlowsMatrix.Cells[1,7]:=FloatToStr(Round(G_heatex_out));  
FlowsMatrix.Cells[2,7]:=FloatToStr(Round(T_heatex_out));  
FlowsMatrix.Cells[3,7]:=FloatToStr(RoundTo(m_heatex_out[1],-1));  
FlowsMatrix.Cells[4,7]:=FloatToStr(RoundTo(m_heatex_out[2],-1));  
HeatExchanger(G_sep_out[2],T_sep_out,Cp_sep_out,m_sep_out);
```

```
//Поток 8
```

```
FlowsMatrix.Cells[1,8]:=FloatToStr(Round(G_heatex_out));  
FlowsMatrix.Cells[2,8]:=FloatToStr(Round(T_heatex_out));  
FlowsMatrix.Cells[3,8]:=FloatToStr(RoundTo(m_heatex_out[1],-1));  
FlowsMatrix.Cells[4,8]:=FloatToStr(RoundTo(m_heatex_out[2],-1));
```

```
//Вывод результатов расчета
```

```
//Поток 1
```

```
FlowsMatrix.Cells[1,1]:=FloatToStr(Round(G_mix_in[1]));  
FlowsMatrix.Cells[2,1]:=FloatToStr(Round(T_mix_in[1]));  
FlowsMatrix.Cells[3,1]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_in[1,1],-1));  
FlowsMatrix.Cells[4,1]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_in[1,2],-1));
```

```
//Поток 2
```

```
FlowsMatrix.Cells[1,2]:=FloatToStr(Round(G_mix_in[2]));  
FlowsMatrix.Cells[2,2]:=FloatToStr(Round(T_mix_in[2]));  
FlowsMatrix.Cells[3,2]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_in[1,3],-1));  
FlowsMatrix.Cells[4,2]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_in[2,1],-1));
```

//Поток 3

```
FlowsMatrix.Cells[1,3]:=FloatToStr(Round(G_mix_in[3]));  
FlowsMatrix.Cells[2,3]:=FloatToStr(Round(T_mix_in[3]));  
FlowsMatrix.Cells[3,3]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_in[2,2],-1));  
FlowsMatrix.Cells[4,3]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_in[2,3],-1));
```

//Поток 4

```
FlowsMatrix.Cells[1,4]:=FloatToStr(Round(G_mix_out));  
FlowsMatrix.Cells[2,4]:=FloatToStr(Round(T_mix_out));  
FlowsMatrix.Cells[3,4]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_out[1],-1));  
FlowsMatrix.Cells[4,4]:=FloatToStr(RoundTo(m_mix_out[2],-1));
```

//Поток 5

```
FlowsMatrix.Cells[1,5]:=FloatToStr(Round(G_sep_out[1]));  
FlowsMatrix.Cells[2,5]:=FloatToStr(Round(T_sep_out));  
FlowsMatrix.Cells[3,5]:=FloatToStr(RoundTo(m_sep_out[1],-1));  
FlowsMatrix.Cells[4,5]:=FloatToStr(RoundTo(m_sep_out[2],-1));
```

//Поток 6

```
FlowsMatrix.Cells[1,6]:=FloatToStr(Round(G_sep_out[2]));  
FlowsMatrix.Cells[2,6]:=FloatToStr(Round(T_sep_out));  
FlowsMatrix.Cells[3,6]:=FloatToStr(RoundTo(m_sep_out[1],-1));  
FlowsMatrix.Cells[4,6]:=FloatToStr(RoundTo(m_sep_out[2],-1));
```

end;

end;

end.

Лабораторная работа № 3.

Построение интеллектуальной системы для диагностики причин отклонений в работе промышленной установки

Цель работы: построить интеллектуальную систему для диагностики причин отклонений в работе промышленной установки каталитического риформинга бензинов.

Задание:

1. Разработать программу диагностики причин отклонений в работе промышленной установки на языке Pascal ABC.
2. Разработать интерфейс приложения в среде Delphi для диагностики причин отклонений в работе промышленной установки.
3. С помощью разработанных программ на основании причины отклонения вывести рекомендации для устранения отклонения.

Исходные данные:

Отклонения:

- снизилось качество целевого продукта (октановое число катализата);
- изменилось давление в реакторном блоке;
- изменился температурный режим.

Для выполнения данного задания удобнее всего описывать содержимое фреймов в виде массивов строковых данных, которые будут обрабатываться по единому алгоритму, построенному согласно набору правил, соответствующему логической цепочке рассуждений.

Текст программы на языке Pascal ABC представлен ниже, список идентификаторов, используемых в программе, приведен в табл. 13.

Program Recomend;

//uses crt;

label 1, 2, 3;

const n1=2; n2=16; n3=29;

var

o:array [1..n1] of string [45];

p:array [1..n2] of string [120];

r:array [1..n3] of string [130];

no:array [1..n1] of integer;

np:array [1..n2] of integer;

k,k1,i,i1,i2:integer;

```

w,w1,now:string;
ot,pr,rek,a,a1,d,n:string;
d1,r1:text;
begin
// clrscr;
assign (d1,'Dan.pas');
  assign (r1,'Recom.pas');
  reset (d1);
rewrite (r1);
  readln (d1,ot); d:='да'; n:='нет'; w:=d+'/'+n+'?';
  for i:=1 to n1 do
readln (d1,o[i]);
no[1]:=10; no[2]:=6;
readln (d1,pr);
  for i:=1 to n2 do readln (d1,p[i]);
  np[1]:=1; np[2]:=1; np[3]:=4; np[4]:=2; np[5]:=2; np[6]:=1; np[7]:=4;
np[8]:=2; np[9]:=2; np[10]:=2;
  np[11]:=1; np[12]:=3; np[13]:=1; np[14]:=1; np[15]:=1; np[16]:=1;
  readln (d1,rek);
  for i:=1 to n3 do readln (d1,r[i]);
  writeln ('Отвечайте на вопросы "да" или "нет"'); close (d1);
  now:='Неправильно ответили на вопрос, повторите ответ';
  k:=1; k1:=1;
  for i:=1 to n1 do
begin
  w1:='Отклонением является: '+o[i];
  1:
writeln (w1);
  writeln (w);
  readln (a);
  if a=d then
begin
    for i1:=k to n2 do begin
      w1:='Причиной является: '+p[i1];
      2:
writeln(w1);
writeln(w);
readln(a1);
      if a1=d then
begin
        writeln(rek, ' ');
        writeln(r1,ot, ' ',o[i]);

```

```

writeln(r1,pr,' ',p[i1]);
    writeln(r1,rek,' ');
    for i2:=1 to np[i1] do
        begin
writeln(i2,' ',r[k1]);
writeln(r1,i2,' ',r[k1]);
            k1:=k1+1;
        end;
    goto 3;
end;
    if a1=n then k1:=k1+np[i1];
    if (a1<>d) and (a1<>n) then
        begin
writeln(now);
k1:=k1-np[i1];
goto 2;
        end;
    end;
    end;
    if a=n then
for i1:=1 to no[i] do
k1:=k1+np[i1];
    if(a<>d) and (a<>n) then
        begin
writeln (now);
goto 1;
        end;
    k:=k+no[i];
    end;
3:
close(r1);
end.

```

Таблица 13

Идентификатор	Значение	Тип
n1	Количество отклонений	integer
n2	Количество причин отклонений	integer
n3	Количество рекомендаций	integer
O[1..n1]	Массив списка отклонений	string
NO[1..n1]	Массив, содержащий количество причин, приводящих к соответствующим отклонениям	integer
Pr	Заголовок фрейма «Причины отклонений»	string

p[1..n2]	Массив списка причин отклонений	string
np[1..n2]	Массив, содержащий количество рекомендаций для ликвидации соответствующих причин отклонений	integer
Rek	Заголовок фрейма «Рекомендации»	string
i,i1,i2	Переменные цикла	integer
K	Номер причины отклонения	integer
k1	Номер рекомендации	integer
D	«да»	string
N	«нет»	string
W	«?»	string
w1	Сообщение на экран	string
Now	«Неправильно ответили на вопрос, повторите ответ»	string
a,a1	Ответ на вопрос	string
d1,r1	Устройство ввода, вывода	text
Ot	Заголовок фрейма «Отклонение»	string

Пример решения поставленной задачи в среде программирования Delphi приведен на рис. 37.

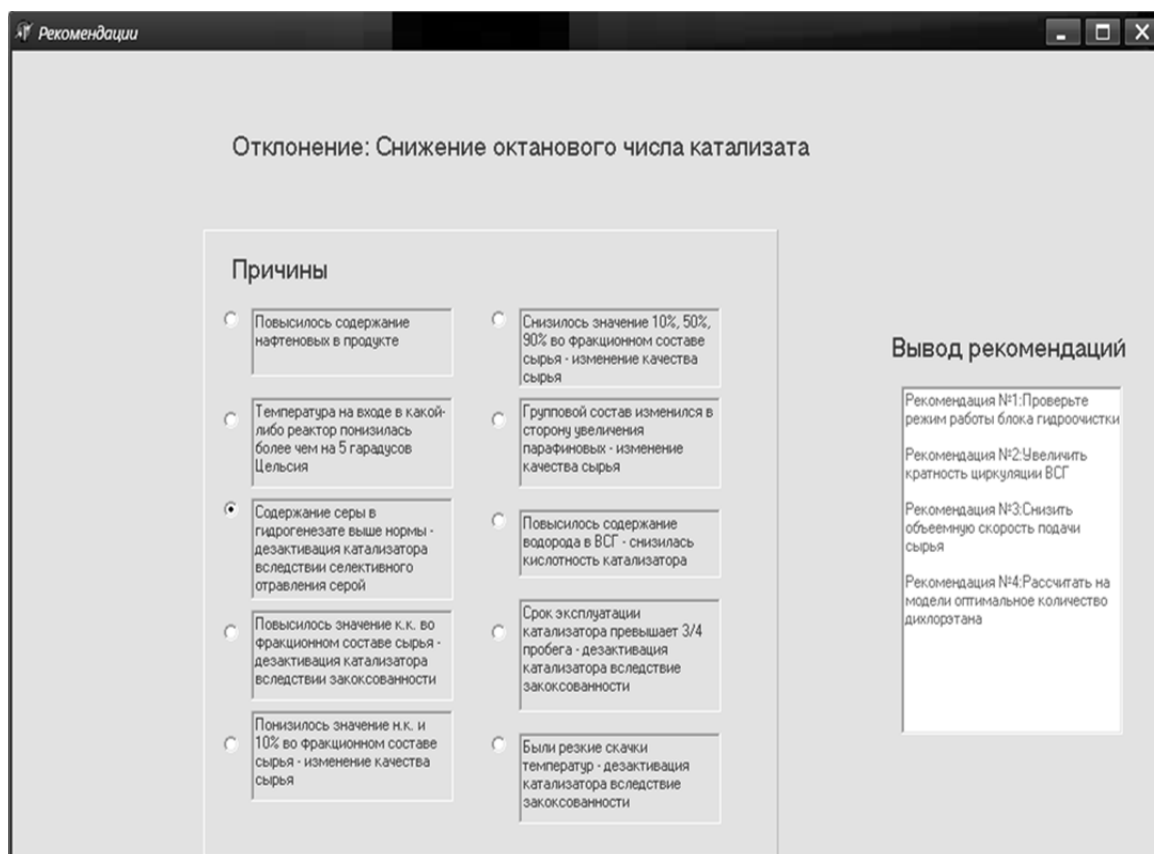


Рис. 37. Пример основного окна программы по диагностике причин отклонений в работе промышленной установки

Лабораторная работа № 4.

Идентификация значений кинетических параметров при математическом моделировании химических превращений

Цель работы: идентификация значений кинетических параметров при математическом моделировании химических превращений решением обратной кинетической задачи методом Эйлера и Рунге–Кутты.

Исходные данные:

Реакции



Вещество	Начальная концентрация	Конечная концентрация
$C_{10}H_{22}$	1	0,14
$C_{10}H_{20}$	0	0,47
$C_{10}H_{18}$	0	0,40
H_2	0	1,26

Время контакта $t_k = 1$ с.

Задание:

1. Составить программу среде программирования Pascal ABC и Delphi для решения обратной кинетической задачи методом Эйлера и Рунге–Кутты.

2. Построить графики изменения концентраций веществ по времени.

Пример решения поставленной задачи в среде программирования Pascal ABC (рис. 38) и Delphi (рис. 39) приведен ниже.

t	$C(C_{10}H_{22})$	$C(C_{10}H_{20})$	$C(C_{10}H_{18})$	$C(H_2)$
Расч				
0.0	1.00	0.00	0.00	0.00
0.1	0.82	0.18	0.00	0.18
0.2	0.67	0.31	0.02	0.35
0.3	0.55	0.40	0.05	0.50
0.4	0.45	0.46	0.09	0.64
0.5	0.37	0.49	0.14	0.77
0.6	0.30	0.51	0.19	0.88
0.7	0.25	0.51	0.24	0.99
0.8	0.20	0.50	0.29	1.09
0.9	0.17	0.49	0.34	1.18
1.0	0.14	0.47	0.39	1.26
Эксп				
1	0.14	0.47	0.40	1.26
Погрешность, %				
	1.94	0.04	1.77	0.35
Константы скоростей реакции				
$k_1=1.801$				
$k_2=1.02$				

Рис. 38. Результаты расчета

По полученным расчетным данным строится график зависимости концентрации веществ от времени контакта.

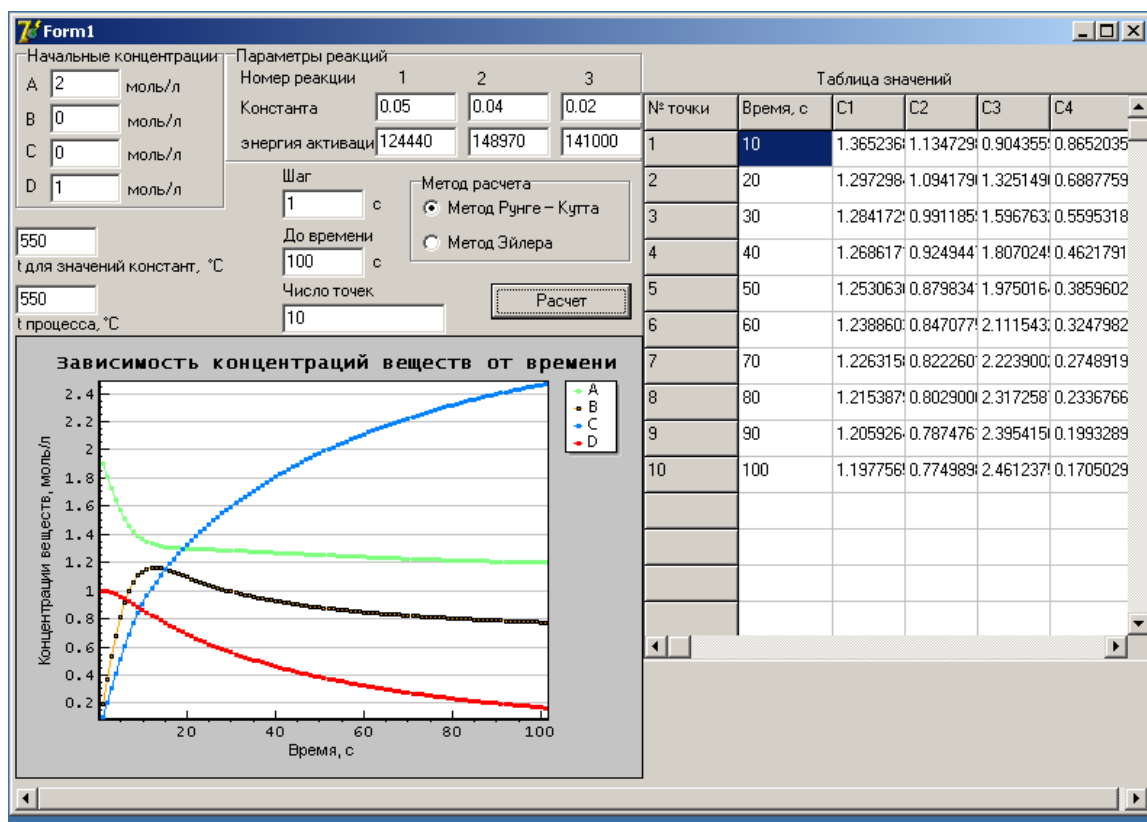


Рис. 39. Главное окно программы идентификации значений кинетических параметров

Программный код для решения поставленной задачи:

unit Unit1;

interface

uses

Windows, Messages, SysUtils, Variants, Classes, Graphics, Controls, Forms, Dialogs, StdCtrls, Grids, Math;

type

TForm1 = **class**(TForm)

SG1: TStringGrid;

Label1: TLabel;

Button1: TButton;

Edit1: TEdit;

Label2: TLabel;

Label3: TLabel;

Edit2: TEdit;

```
SG2: TStringGrid;
Label4: TLabel;
Edit3: TEdit;
Label5: TLabel;
Label6: TLabel;
Edit4: TEdit;
Label7: TLabel;
Label8: TLabel;
Label9: TLabel;
procedure FormCreate(Sender: TObject);
procedure Button1Click(Sender: TObject);
private
  { Private declarations }
public
  { Public declarations }
end;
type
mas4=array[1..4] of real;
var
  Form1: TForm1;
  tk,h:real;
  C,F,Er,Ckexp:mas4;
  t,k1,k2:real;
  i,k:integer;
implementation
  {$R *.dfm}
Procedure P(C:mas4; var F:mas4);
Begin
  F[1]:=-k1*C[1];
  F[2]:=k1*C[1]-k2*C[2];
  F[3]:=k2*C[2];
  F[4]:=k1*C[1]+k2*C[2];
end;
procedure TForm1.FormCreate(Sender: TObject);
var
  i:integer;
begin
  SG1.Cells[0,0]:='Вещество';
  SG1.Cells[1,0]:='C9H20';
  SG1.Cells[2,0]:='C9H18';
  SG1.Cells[3,0]:='C9H16';
```

```
SG1.Cells[4,0]:='H2';
SG1.Cells[0,1]:='СН, моль/л';
SG1.Cells[1,1]:='1';
SG1.Cells[2,1]:='0';
SG1.Cells[3,1]:='0';
SG1.Cells[4,1]:='0';
SG1.Cells[0,2]:='Ск (эксп.), моль/л';
SG1.Cells[1,2]:='0,14';
SG1.Cells[2,2]:='0,47';
SG1.Cells[3,2]:='0,40';
SG1.Cells[4,2]:='1,26';
SG1.ColWidths[0]:=100;
Edit1.Text:='1,80';
Edit2.Text:='1,03';
Edit3.Text:='1';
Edit4.Text:='0,1';
SG2.Cells[0,0]:='t';
SG2.Cells[1,0]:='C (C9H20)';
SG2.Cells[2,0]:='C (C9H18)';
SG2.Cells[3,0]:='C (C9H16)';
SG2.Cells[4,0]:='C (H2)';
SG2.ColWidths[0]:=100;
SG2.RowCount:=1;
end;
procedure TForm1.Button1Click(Sender: TObject);
var
i:integer;
begin
SG2.RowCount:=2;
k1:=StrToFloat(Edit1.Text);
k2:=StrToFloat(Edit2.Text);
tk:=StrToFloat(Edit3.Text);
h:=StrToFloat(Edit4.Text);
for i:=1 to 4 do
begin
C[i]:=StrToFloat(SG1.Cells[i,1]);
end;
t:=0; k:=1;
repeat
t:=t+h;
P(C,F);
```

```
for i:=1 to 4 do
C[i]:=C[i]+h*F[i];
k:=k+1;
SG2.RowCount:=k;
SG2.Cells[0,k]:=FloatToStr(RoundTo(t,-1));
SG2.Cells[1,k]:=FloatToStr(RoundTo(C[1],-2));
SG2.Cells[2,k]:=FloatToStr(RoundTo(C[2],-2));
SG2.Cells[3,k]:=FloatToStr(RoundTo(C[3],-2));
SG2.Cells[4,k]:=FloatToStr(RoundTo(C[4],-2));
until RoundTo(t,-1)=RoundTo(tk,-1);
SG2.RowCount:=k+3;
SG2.Cells[0,k+1]:='Ск (эксп.)';
SG2.Cells[0,k+2]:='Погрешность, %';
SG2.Cells[0,1]:='0,0';
for i:=1 to 4 do
begin
SG2.Cells[i,1]:=SG1.Cells[i,1];
Ckexp[i]:=StrToFloat(SG1.Cells[i,2]);
SG2.Cells[i,k+1]:=FloatToStr(RoundTo(Ckexp[i],-2));
Er[i]:=100*abs((Ckexp[i]-C[i])/Ckexp[i]);
SG2.Cells[i,k+2]:=FloatToStr(RoundTo(Er[i],-2));
end;
end;
end.
```

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Пособие состоит из девяти глав, в которых изложены теоретические основы системного анализа процессов и аппаратов химической технологии. Приведены методологические основы синтеза и анализа химико-технологических систем, а также принципы системного анализа процессов и аппаратов химической технологии как многоэтапной процедуры принятия решений. Изложены научные концепции проектирования новых и оптимизации действующих химических производств. Показана с позиции системного анализа взаимосвязь явлений в отдельных процессах и аппаратах химико-технологических систем.

Системный анализ процессов химической технологии топлива и высокоэнергетических веществ представляет взаимосвязь фундаментальных и прикладных исследований в области химии и технологий переработки в основном жидких и газообразных топлив, в том числе нефти, нефтепродуктов, газовых конденсатов, газа, сланцев, процессов синтеза специальных продуктов с повышенной эффективностью действия и эксплуатационной надежностью позволяет решать задачи оптимизации и прогнозирования химических производств.

Лабораторный практикум позволяет отработать практические навыки по применению стратегии системного анализа процессов и аппаратов химической технологии посредством программной реализации математических моделей и моделей для представления знаний.

Весь изложенный в пособии материал сопровождается большим количеством примеров. Приведены образцы работающих программ для решения прикладных задач, встречающихся в деятельности будущего специалиста.

Представляемое учебное пособие ориентировано прежде всего на студентов химико-технологических специальностей вузов, а также инженеров-технологов химических, нефтехимических и нефтеперерабатывающих производств.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кравцов А.В. Компьютерное прогнозирование и оптимизация производства бензинов. Физико-химические и технологические основы / А.В. Кравцов, Э.Д. Иванчина. – Томск : STT, 2000. – 192 с.
2. Бесков В.С. Общая химическая технология и основы промышленной экологии / В.С. Бесков. – Москва : Химия, 1999. – 472 с.
3. Мешалкин В.П. Экспертные системы в химической технологии / В.П. Мешалкин. – Москва : Химия, 1995. – 346 с.
4. Кафаров В.В. Математическое моделирование основных процессов химических производств / В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. – Москва : Высшая школа, 1991. – 400 с.
5. Кравцов А.В. Интеллектуальные системы в химической технологии и инженерном образовании / А.В. Кравцов, Э.Д. Иванчина. – Новосибирск : Наука, 1997. – 200 с.
6. Kravtsov A.V., Ivanchina E.D. // React. Kinet. Catal. Lett. – 1997. – Vol. 30. – № 12. – P. 199–204.
7. Слинько М.Г. Пленарные лекции конференции по химическим реакторам / М.Г. Слинько. – Новосибирск : Химреактор – 13, 1996. – 180 с.
8. Бесков В.С. Моделирование каталитических процессов и реакторов / В.С. Бесков. – Москва : Химия, 1991. – 252 с.
9. Мешалкин В.П. Экспертные системы в химической технологии / В.П. Мешалкин. – Москва : Химия, 1995. – 368 с.
10. Кафаров В.В. Системный анализ процессов химической технологии / В.В. Кафаров, И.Н. Дорохов, Л.Н. Липатов. – Москва : Наука, 1979. – 394 с.
11. Иванчина Э.Д. Построение интеллектуальной системы с использованием компьютерной среды Delphi. Методические указания к лабораторной работе для студентов химико-технологического факультета / Э.Д. Иванчина, Е.Н. Ивашкина. – Томск : Изд-во ТПУ, 2007. – 40 с.
12. Иванчина Э.Д. Основы алгоритмизации и программирования на языке Pascal. Методические указания к лабораторной работе для студентов химико-технологического факультета / Э.Д. Иванчина, Е.Н. Ивашкина. – Томск : Изд-во ТПУ, 2007. – 38 с.
13. Иванчина Э.Д. Системный анализ процесса компаундирования товарных бензинов. Методические указания к лабораторной работе для студентов химико-технологического факультета / Э.Д. Иванчина, А.Л. Абрамин. – Томск : Изд-во ТПУ, 2004. – 11 с.
14. Системный анализ процесса компаундирования товарных бензинов. Методические указания к лабораторной работе для студентов ХТФ / Э.Д. Иванчина, Д.С. Полубоярцев, Д.В. Подройкин и др. – Томск : Изд-во ТПУ, 2005. – 11 с.

Учебное издание

ИВАНЧИНА Эмилия Дмитриевна
ЧЕРНЯКОВА Екатерина Сергеевна
БЕЛИНСКАЯ Наталия Сергеевна
ИВАШКИНА Елена Николаевна

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ И АППАРАТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Учебное пособие

Научный редактор
*доктор технических наук,
профессор Э.Д. Иванчина*

Корректурa *Е.Л. Тен*
Компьютерная верстка *О.Ю. Аршинова*
Дизайн обложки *Т.В. Буланова*

Подписано к печати 30.11.2017. Формат 60х84/16. Бумага «Снегурочка».
Печать CANON. Усл. печ. л. 6,69. Уч.-изд. л. 6,05.
Заказ 304-17. Тираж 100 экз.



Издательство

ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ