

**А.Н. ПАХОМОВ, В.И. КОНОВАЛОВ,  
Н.Ц. ГАТАПОВА, А.Н. КОЛИУХ**

**ОСНОВЫ  
МОДЕЛИРОВАНИЯ  
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ  
СИСТЕМ**

**ИЗДАТЕЛЬСТВО ТГТУ**

УДК 001.573(075)  
ББК Л11-1с116я73  
П217

Рецензенты:

Доктор технических наук, профессор кафедры ТГТУ  
«Системы автоматизированного проектирования»  
*Ю.В. Литовка*

Доктор технических наук, профессор кафедры  
ТГУ имени Г.Р. Державина  
«Компьютерное и математическое моделирование»  
*А.А. Арзамасцев*

**Пахомов, А.Н.**

П217 Основы моделирования химико-технологических систем : учебное пособие / А.Н. Пахомов, В.И. Коновалов, Н.Ц. Гатапова, А.Н. Колиух. – Тамбов : Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2008. – 80 с. – 100 экз. – ISBN 978-5-8265-0767-4.

Изложен теоретический и практический материал, посвященный моделированию химико-технологических систем с использованием программного комплекса ChemCAD. Изложены основные принципы построения ХТС, задачи и методы расчёта. Представлено построение моделей отдельных наиболее распространённых элементов ХТС. Описано применение пакета ChemCAD для моделирования ХТС.

Предназначено для студентов, магистрантов и аспирантов химико-технологических специальностей, а также для работников химической и смежных отраслей промышленности, интересующихся вопросами расчёта и моделирования химико-технологических процессов.

УДК 001.573(075)  
ББК Л11-1с116я73

ISBN 978-5-8265-0767-4

© ГОУ ВПО «Тамбовский государственный  
технический университет», (ТГТУ), 2008

Министерство образования и науки Российской Федерации  
ГОУ ВПО «Тамбовский государственный технический университет»

**А.Н. ПАХОМОВ, В.И. КОНОВАЛОВ,  
Н.Ц. ГАТАПОВА, А.Н. КОЛИУХ**

## **ОСНОВЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Утверждено учёным советом университета  
в качестве учебного пособия для студентов, магистрантов и аспирантов  
химико-технологических специальностей



---

Тамбов  
◆ Издательство ТГТУ ◆  
2008

Учебное издание

ПАХОМОВ Андрей Николаевич,  
КОНОВАЛОВ Виктор Иванович,  
ГАТАПОВА Наталья Цибиковна,  
КОЛИУХ Александр Николаевич

**ОСНОВЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ  
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Учебное пособие

Редактор Ю.В. Ш и м а н о в а  
Инженер по компьютерному макетированию М.А. Филатова

Подписано в печать 27.11.2008.  
Формат 60 × 84/16. 4,65 усл. печ. л. Тираж 100 экз. Заказ № 543.

Издательско-полиграфический центр  
Тамбовского государственного технического университета  
392000, Тамбов, Советская, 106, к. 14

# ВВЕДЕНИЕ

Любое химическое, пищевое, фармацевтическое, машиностроительное производство, реализующее определённую сложную технологию производства, представляет собой специфическую химико-технологическую систему (ХТС), состоящую из большого количества аппаратов и технологических связей между ними. Проектирование и эксплуатация подобного производства требует глубоких знаний и умений в конкретной предметной области.

При разработке новой ХТС или модернизации существующей основная задача заключается в создании такого объекта химического производства, который позволит получать продукцию заданного качества в требуемом объёме наиболее экономически целесообразным путём. При эксплуатации существующей ХТС необходимо таким образом управлять производством, чтобы при высокой производительности и низких затратах обеспечить получение продукта требуемого качества и реализовать максимально возможную экологическую безопасность производства. При эксплуатации ХТС необходимо не только понимать принципы организации и функционирования производства, заложенные в технологическую схему при её проектировании, но и учитывать возможные изменения параметров сырья, требований к конечной продукции, а также уметь реагировать на непрерывное изменение параметров работы оборудования вследствие определённого расходования его ресурсов, возможных аварий, пусков, остановок и т.д.

Целью курса «Основы моделирования химико-технологических систем» является изучение основных представлений о принципах построения ХТС, задачах и методах их расчёта, а также ознакомление студентов со способами построения моделей отдельных наиболее распространённых элементов ХТС. Одной из основных целей ставилась необходимость изучения и дальнейшего применения студентами, а в будущем инженерами, программного комплекса ChemCAD для моделирования химико-технологических систем.

## 1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ

Как известно, любое химическое производство представляет собой совокупность большого количества аппаратов, внутри которых протекают различные химико-технологические процессы (ХТП), взаимосвязанные между собой потоками сырья, продуктов и энергоносителей. Так как химическое производство перерабатывает определённое сырьё и выпускает конкретную продукцию, то можно заключить, что весь комплекс взаимосвязанных аппаратов и потоков работает в масштабах переработки сырья и выпуска продукции как единое целое, т.е. как система.

Совокупность взаимосвязанных технологическими потоками и действующих как единое целое аппаратов, в которых осуществляется определённая последовательность технологических операций с целью выпуска конкретной продукции – называется химико-технологической системой (ХТС).

Следует отметить, что аппараты обычно представляют собой достаточно сложные технологические системы, следовательно, их также можно рассматривать как ХТС.

Покажем это на примере ректификационной колонны со встроенным кипятильником и дефлегматором (рис. 1.1).

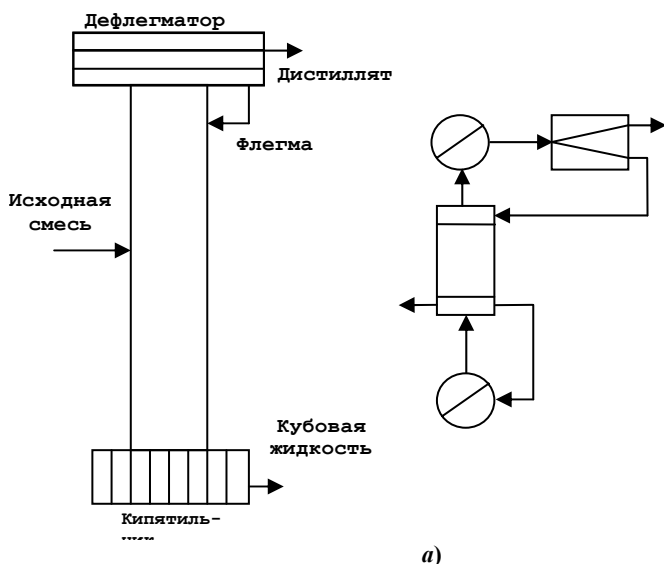


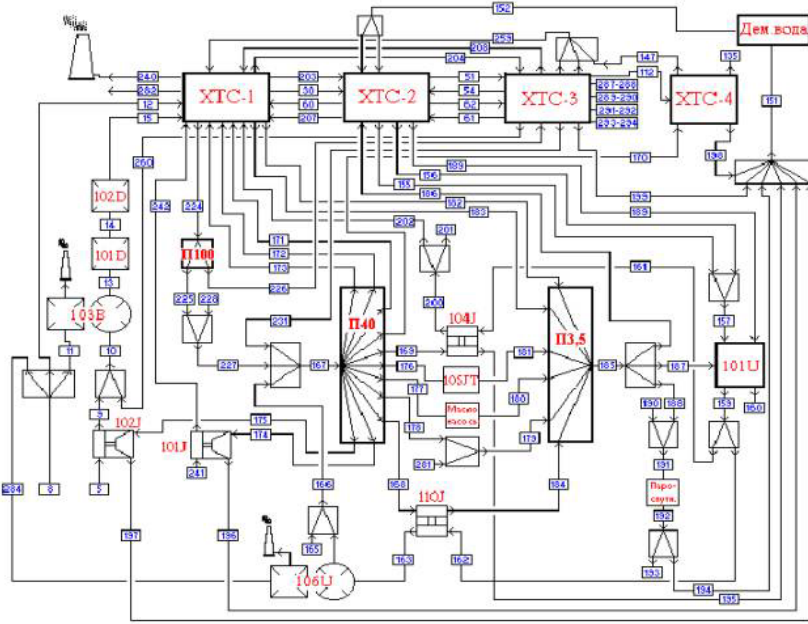
Рис. 1.1. Схемы ректификационной колонны:

**а – общая схема ректификационной колонны (аппарата);**

**б – операторная технологическая схема ректификационной колонны**

В одном случае (рис. 1.1, а), колонна рассматривается как единый вертикальный цилиндрический аппарат, в который входит исходная смесь, а выходит кубовая жидкость и дистиллят. Таким образом, если нет необходимости рассматривать процессы, происходящие внутри колонны, то её можно изобразить как аппарат межфазного обмена с заданной степенью превращения.

В случае, если требуется рассмотреть влияние процессов, происходящих внутри колонны, например: определить требуемое количество флегмы на орошение, количество тарелок, требуемую поверхность теплообмена в кипятильнике и дефлегматоре и т.п., то необходимо рассматривать колонну с учётом её элементов, функционально влияющих на работу ап-



парта, например, на уровне технологических операторов (рис. 1.1, б). В этом случае она будет состоять из двух теплообменников, одного делителя потоков и блока межфазного обмена.

Таким образом, в зависимости от необходимости, ХТС может быть рассмотрена на любом уровне сложности её элементов.

Элементом ХТС называется часть ХТС, которая в конкретном рассмотрении является неделимой.

В качестве более сложного примера рассмотрим технологическую схему производства аммиака (рис. 1.2 и 1.3).

Рис. 1.2. Функциональная схема производства аммиака

Как видно на рис. 1.2, элементами ХТС производства аммиака являются элементы,

условно называемые ХТС-1, ХТС-2, ХТС-3 и ХТС-4, т.е. в конкретном рассмотрении ХТС нет необходимости их детализации. Иным образом, в конкретном рассмотрении они являются своеобразными «чёрными ящиками», выполняющими функции преобразования входных параметров в выходные. В случае необходимости каждый из этих элементов (или все указанные элементы) может быть детализован. Например, на рис. 1.3 представлена ХТС оператора ХТС-1 в более детальном – операторном виде. В случае необходимости элементы схемы, представленной на рис. 1.3, также могут быть детализованы.

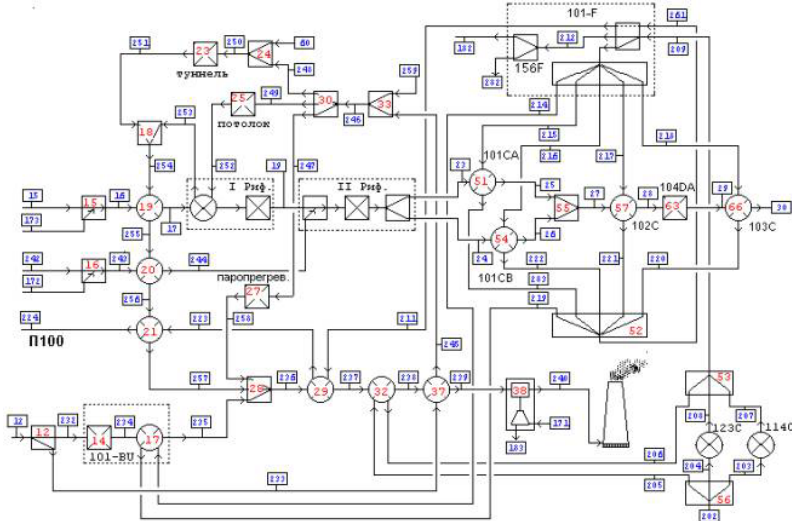


Рис. 1.3. Операторная схема ХТС-1

Таким образом, в общем виде, как сама технологическая установка, так и каждый её элемент (который также является технологической системой, но младшего иерархического уровня) могут быть изображены в виде схемы, представленной на рис. 1.4.

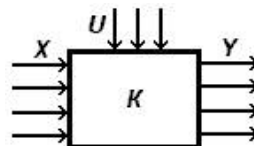


Рис. 1.4. Принципиальная схема элемента (подсистемы) ХТС

В данном случае к входным и выходным технологическим параметрам ( $X$ ,  $Y$ ) относятся параметры технологических потоков: температура, расход, состав, давление, теплота и т.д.; к параметрам управления ( $U$ ) – степень открытия заслонки, мощность двигателя компрессора и т.д.; к параметрам установки ( $K$ ) – текущую активность катализатора, активную поверхность теплообменника и т.д. Так как входные и выходные технологические параметры характеризуют потоки вещества и энергии, то, как для режима работы всей установки, так и для режима работы каждого её элемента можно составить материальный и энергетический балансы. Таким образом, выходные технологические параметры будут чётко зависеть от входных технологических параметров, параметров управления и установки:

$$Y=f(X, U, K).$$

В данном уравнении функция  $f(X, U, K)$  характеризует протекающие процессы, которые с достаточной степенью точности могут быть отображены через совокупность физико-химических закономерностей протекающих процессов, и связывающие изменение температуры, давления, объёма, концентрации и т.д. в этих процессах. Таким образом, каждый элемент ХТС представляет собой некую подсистему, являющуюся одновременно элементом ХТС.

С целью *классификации* элементов ХТС применяется иерархический принцип. Обычно различают четыре основных уровня иерархии элементов (подсистем) ХТС:

1. Типовые ХТП и их совокупность в масштабах машин и *аппаратов*.

2. Агрегаты и комплексы, представляющие совокупность типовых процессов в масштабах производств и их отдельных участков.

3. Совокупность производств в масштабе выпуска товарной продукции.

4. Химическое предприятие в целом.

Подобная классификация, по уровням иерархии, является условной и в зависимости от конкретной задачи может появиться необходимость, например, рассмотреть типовые ХТП на уровнях подсистем их элементов (уровень ниже первого) или рассмотреть совокупность предприятий в региональном масштабе (уровень выше четвёртого). Однако при переходе на другие уровни или при одновременном рассмотрении ХТС на различных уровнях следует учитывать универсальные принципы построения элементов (подсистем) ХТС и их функционирования.

2. Типовые технологические операторы

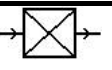
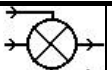
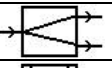
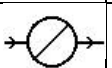
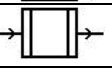
Химико-Технологических систем

Как было показано выше, существует множество иерархических уровней представления ХТС. Однако при рассмотрении ХТС с целью её расчёта с составлением теплового и материального балансов, расчёта и *оптимизации* её элементов рекомендуется использовать в качестве низшего уровня представления элементов ХТС типовые технологические *операторы*, соответствующие первому уровню представления ХТС.

Из всего множества технологических процессов различают только семь типовых технологических операторов, с использованием которых возможно синтезировать ХТС любой сложности.

Типовые технологические операторы обычно делят на основные и вспомогательные технологические операторы (табл. 2.1).

Таблица 2.1

Основные технологические операторы		Вспомогательные технологические операторы	
	Химическое превращение		Нагрева и охлаждения
	Смешение		Сжатия и расширения
	Разделение		Изменения агрегатного состояния вещества
	Межфазный массообмен		

Различия между основными и вспомогательными *операторами* заключаются в том, что основные технологические *операторы* обеспечивают функционирование ХТС в требуемом целевом направлении, а вспомогательные – повышают эффективность функционирования системы путём изменения её энергетического и фазового состояний.

Следует добавить, что математическое описание типовых технологических процессов достаточно хорошо представлено в специальной литературе и подробно изучается в курсе «Математическое моделирование ХТП», читаемого на кафедре «Химическая инженерия».

### 3. Виды технологических связей между операторами

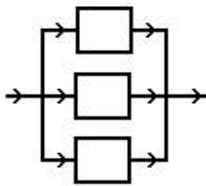
При всей сложности ХТС существуют типовые соединения *операторов* между собой, объединяющие их в единую схему. К ним относятся: последовательное, параллельное, последовательно-обводное (байпасное) и рециркуляционное соединения. Существует также разновидность сложных соединений, объединяющих несколько типов элементарных соединений одновременно.

Последовательное соединение:



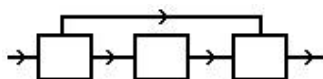
Последовательное соединение является основным соединением технологических операторов между собой. При этом соединении весь технологический поток, выходящий из предыдущего элемента ХТС, полностью поступает на последующий элемент ХТС, причём через каждый элемент поток проходит только один раз.

Параллельное соединение:



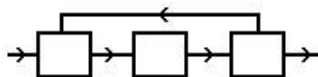
При параллельном соединении, технологический поток разделяется на несколько потоков, которые поступают на различные элементы ХТС, причём каждый аппарат поток проходит только один раз. Выходящие из элементов потоки могут объединяться в один поток, а могут выходить раздельно.

Последовательно-обводное (байпасное) соединение:



При последовательно-обводном (байпасном) соединении через ряд последовательно соединённых элементов ХТС проходит только часть потока, другая часть обходит часть аппаратов, а затем соединяется с частью потока, прошедшего через элементы ХТС.

Рециркуляционное соединение:



Рециркуляционное соединение характеризуется наличием обратного технологического потока в системе последовательно соединённых элементов, который связывает выход одного из последующих элементов с входом одного из предыдущих элементов. ХТС с использованием этой связи характеризуются коэффициентом рециркуляции, т.е. отношением рециркулирующего потока к суммарному (коэффициент всегда меньше единицы).

Следует учесть, что при синтезе и оптимизации ХТС обычно требуется рассматривать достаточно большое количество вариантов схем, отличающихся технологической топологией. Сократить это количество, а, следовательно, сэкономить время и деньги помогает, наряду с интуицией разработчика, его умение предварительно оценить эффект, который возможно ожидать при различных видах соединений между элементами ХТС.

Так, например, каскад реакторов идеального смешения (РИС), представляющий собой ряд последовательно соединённых реакторов, вследствие изменения гидродинамической обстановки будет приближаться к реактору идеального вытеснения (РИВ). Таким образом, замена одного РИС на каскад РИС *даёт* положительный эффект. Замена одного РИВ на каскад РИВ не *даёт* никакого эффекта, однако, в случае, если длина РИВ требуется достаточно большой, то бывает более целесообразно (с точки зрения более компактной планировки оборудования) заменить один большой реактор на каскад меньших реакторов.

В качестве примера рассмотрим некоторые основные *эвристики* по применению различных видов связей между реакторами:

- замена одного РИС на каскад РИС, т.е. последовательно соединённых аппаратов (без изменения общего времени контакта), позволяет достичь большей степени превращения за счёт изменения гидродинамической обстановки и уменьшить конструктивный размер каждого реактора. Замена одного РИВ на каскад РИВ позволяет только сократить конструктивный размер каждого реактора;

- замена одного РИВ или РИС на ряд параллельно работающих реакторов не снижает общую эффективность, но уменьшает конструктивные размеры параллельно работающих реакторов;

- параллельное подключение дополнительного *аппарата* позволяет увеличить нагрузку по сырью при сохранении неизменной степени превращения или, возможно, достичь более высокой степени превращения (без изменения скорости подачи сырья) за счёт увеличения времени пребывания;

- последовательное соединение применяют, когда необходимо провести химическое превращение в несколько стадий для эндо- или экзотермических реакций (особенно обратимых), протекающих в адиабатических реакторах, так как позволяет на каждой стадии поддерживать оптимальную;

- последовательное соединение применяют, когда необходимо провести технологический процесс с выделением какого-либо компонента после каждой стадии (например, в многоступенчатом воздушном компрессоре после каждой ступени сжатия происходит охлаждение газа и выделение капельной влаги);

- параллельное соединение применяют, когда необходимо оптимальным образом распределить нагрузку между параллельно работающими линиями, отличающимися по производительности, например, вследствие падения активности катализатора, загрязнения теплообменной поверхности и пр.;

- параллельное соединение применяют, когда необходимо увеличить надёжность производства и обеспечить возможность его работы с минимальной производительностью без снижения эффективности работы оборудования (в случае необходимости параллельные линии могут быть отключены по экономическим соображениям или для ремонта);

- при байпасном соединении вследствие уменьшения потока, идущего через реактор, увеличивается время пребывания в реакторе и увеличивается степень превращения сырья в продукты (в реакторе);



– байпасное соединение применяется при конструировании реакторов для проведения обратимых экзотермических реакций путём смешения «горячего» потока после реактора с «холодным» байпасным потоком, что позволяет достичь высокой степени превращения и оптимальных температур, и, следовательно, высоких скоростей химических реакций (каталитические реакторы, например, окисления  $\text{SO}_2$  в  $\text{SO}_3$  или синтеза аммиака);

– рециркуляция применяется в случаях, когда необходимо увеличить эффективность использования сырья и оборудования за счёт увеличения времени пребывания в рециркулируемых аппаратах без изменения размеров оборудования и гидродинамической обстановки;

– рециркуляция позволяет достичь максимального использования сырья (особенно для обратимых реакций) и увеличить скорость процесса за счёт увеличения концентрации исходных реагентов, которая достигается при выделении целевого продукта на линии рецикла и возвратом исходных реагентов в «голову» процесса (например цикл синтеза аммиака);

– рециркуляция позволяет уменьшить полноту протекания побочных химических реакций посредством разбавления сырья продуктами реакции, поступающими в «голову» процесса по линии рецикла.

Данные эвристики относятся в основном к химическим реакторам, но их возможно применять и для других элементов ХТС. Кроме того, список эвристик для реакторов может быть расширен за счёт эвристик, которые являются следствием указанных выше.

#### 4. Свойства химико-технологических систем

Как известно, ХТС представляет собой совокупность технологических операторов, взаимосвязанных технологическими связями. Так как каждый ХТП имеет собственную рабочую характеристику, определяющуюся сложностью элемента, то объединение элементов в ХТС будет сопровождаться взаимным наложением рабочих характеристик элементов. Ситуация будет усугубляться при усложнении технологических связей между элементами. Таким образом, благодаря объединению элементов в систему, она приобретает новые качества, которыми не обладают элементы в отдельности. Простейший пример наложения характеристик элементов при их объединении в ХТС представлен на рис. 4.1.



Рис. 4.1. Иллюстрация рабочей характеристики ХТС

На рисунке видно, что рабочие характеристики аппаратов, образующих ХТС, имеют монотонный характер без экстремумов, однако рабочая характеристика ХТС в значительной степени отличается от характеристик её элементов.

Как известно, реальные производства содержат многие десятки технологических аппаратов, соединённых различными типами соединений и работающих как единое целое. Таким образом, даже при относительной простоте рабочих характеристик аппаратов, рабочая характеристика ХТС будет достаточно сложна, непредсказуема, и зависеть от топологии ХТС. Следует отметить, что рабочая характеристика ХТС в значительной мере может изменяться даже при неизменном наборе элементов, но при изменении её топологии (данное свойство ХТС называется эмерджентностью). Определение рабочей характеристики ХТС возможно только в результате расчётов или промышленных испытаний.

Рассмотрим другие свойства ХТС, которые необходимо учитывать при проектировании нового или реконструкции существующего производства, а также при эксплуатации существующего:

1. Чувствительность ХТС к внешним и внутренним возмущениям (воздействиям) – это способность системы реагировать на них, т.е. изменять параметры состояния. Необходимо, чтобы система была малочувствительной к возмущениям.

2. Управляемость ХТС – это свойство достигать цели управления. Обычно целью управления является выпуск заданного количества продукции требуемого качества. Для обеспечения требуемой управляемости проектирование ХТС производится совместно с проектированием системы управления.

3. Надёжность системы – свойство сохранять работоспособность в течение заданного времени функционирования. Данная задача решается на этапе проектирования таким образом, чтобы даже при выходе из строя некоторой части вспомогательного оборудования или части системы управления система сохраняла свою работоспособность. Надёжность химических производств – свойство этих объектов выполнять требуемые функции, сохраняя во времени значения установленных эксплуатационных показателей (технологические параметры процессов, производительность, качество продукции, расходы материальных ресурсов и др.). Любое нарушение этих функций приводит к потенциальной возможности аварий и получению некондиционной продукции, что особенно опасно для крупнотоннажных производств.

Надёжность, как комплексное свойство объекта в зависимости от целей его функционирования и условий эксплуатации характеризуется определённой совокупностью понятий и свойств, главными из которых являются работоспособность, отказ, безотказность и ремонтпригодность.

*Работоспособность* – состояние объекта, при котором он может выполнять в данный момент времени заданные функции, сохраняя значения основных параметров в требуемых пределах. Например, в работоспособном состоянии колонны синтеза в производстве карбамида достигается заданная степень превращения  $\text{CO}_2$  (не ниже 0,67), обеспечиваются безопасные

условия труда для обслуживающего персонала и уровень загрязнения окружающей среды не превышает установленных норм.

*Отказ* заключается в нарушении или утрате работоспособности объекта. Например, при отказе химического реактора качество продукта перестаёт отвечать требуемым нормам. Такой отказ может быть вызван разными причинами: нарушениями температурного режима, отравлением катализатора, механическими повреждениями и т.д. Как правило, отказы аппаратуры требуют аварийного останова производства с последующим выполнением определённого объёма ремонтных работ. Одно из средств предупреждения отказов оборудования – профилактические осмотры и ремонты.

*Безотказность* – это свойство объекта непрерывно сохранять работоспособность в течение некоторого времени или для наработки определённого количества продукта.

*Ремонтопригодность* – свойство объекта, заключающееся в приспособленности к предупреждению и отысканию причин возникновения его отказов, а также в способности восстановления утраченной при этом работоспособности. Последняя обычно ограничена во времени, поэтому для нормальной эксплуатации химического производства характерны плановые остановы с целью выполнения профилактических и восстановительных ремонтных работ.

*Общая характеристика отказов.* Конкретные физико-химические, технологические, механические и другие изменения и повреждения, возникающие в объектах и окружающей среде после отказа, приводят к различным последствиям. Особо тяжёлые последствия отказов – аварии, сопровождающиеся взрывами, пожарами и выбросами вредных веществ. По причинам возникновения различают отказы проектно-конструкторские (доля в общем числе отказов 40...50 %), производственно-изготовительные (30...40 %) и эксплуатационно-технологические (15...25 %).

Проектно-конструкторские отказы обусловлены несовершенством организации проектирования процессов и производств и конструирования оборудования, включая нарушения установленных правил и норм, а также ошибками разработчиков.

Производственно-изготовительные отказы обусловлены нарушениями или несовершенством технологических процессов изготовления, сборки, монтажа оборудования, а также низким качеством выполнения пусконаладочных работ.

Эксплуатационно-технологические отказы обусловлены нарушениями в работе систем контроля и автоматики, ошибками обслуживающего персонала и воздействием окружающей среды.

4. Устойчивость – способность ХТС возвращаться в исходное стационарное состояние после устранения возмущений, вызвавших выход системы из этого состояния.

## 5. Задачи проектирования Химико-технологических систем

Каждый проект ХТС должен содержать:

1. Технологическую топологию ХТС (технологической топологией называют характер и порядок соединения отдельных аппаратов технологической схемы).

2. Диапазоны изменений значений входных переменных, которыми являются физические параметры входных потоков сырья, а также параметры окружающей среды, влияющие на процесс функционирования ХТС.

3. Диапазоны изменений значений технологических параметров ХТС (степени превращения, разделения компонентов, констант скоростей химических реакций, коэффициентов тепло- и массопередачи и т.д.).

4. Конструкционные параметры ХТС (размеры аппаратов, высоты слоёв насадки и т.д.).

5. Рекомендуемые параметры технологического режима работы элементов ХТС (температуры, давления, типы катализатора и т.п.).

6. Параметры технологических потоков, обеспечивающих работу ХТС в заданном режиме (температуры, давления, расходы, состав потоков и т.п.).

Для того, чтобы получить указанные выше параметры необходимо решить ряд задач синтеза ХТС, анализа её структуры, расчёта и оптимизации.

Задача синтеза ХТС в общем случае формулируется следующим образом.

Известны элементы, из которых может быть построена система, сырьё и целевые продукты. При решении задачи синтеза требуется разработать структуру ХТС, требуемую для реализации технологического процесса, т.е. необходимо выбрать элементы из числа имеющихся; установить связи между ними; определить конструктивные и технологические параметры элементов ХТС.

Обычно задача синтеза является многовариантной, т.е. одни и те же значения выходных параметров могут быть обеспечены при различной структуре системы и разных режимах функционирования элементов. Следует отметить, что задача синтеза имеет особенности для *проектирования* нового производства (ХТС) и для реконструкции существующего. Суть отличий заключается в том, что при создании новой ХТС обычно имеется много возможностей выбора элементов и связей между ними, а при реконструкции ХТС требуется сохранить все или часть её элементов, а также все или часть связей между элементами.

Задачи анализа ХТС подразделяются на анализ структуры и анализ качества функционирования ХТС.

Основная цель анализа структуры ХТС заключается в выявлении её структурных особенностей и нахождение оптимальной последовательности расчёта её элементов, а цель анализа качества функционирования ХТС – получение количественных оценок её основных свойств: чувствительности, надёжности, устойчивости и т.д.

Задача расчёта ХТС заключается в получении количественных характеристик, как режимов функционирования элементов ХТС, так и всей системы.

Задача оптимизации ХТС является комплексной, так как она включает в себя как оптимизацию структуры, так и оптимизацию режимов функционирования элементов. Основной целью оптимизации ХТС является обеспечение наиболее высоких технико-экономических показателей.

В заключение следует отметить, что между задачами синтеза, анализа, расчёта и оптимизации существует взаимосвязь, так как при создании нового или реконструкции существующего производства сначала выполняется синтез нескольких аль-

тернативных вариантов ХТС, анализируются их технико-экономические показатели, а затем производится поиск оптимального варианта.

## 6. Синтез Химико-технологических Систем

При проектировании нового или реконструкции существующего производства, одной из главных задач является синтез варианта ХТС, позволяющего достичь высоких технико-экономических показателей. В общем виде задача синтеза ХТС формулируется следующим образом.

Известно: состав и параметры сырьевых и производственных потоков; показатель критерия оптимальности функционирования ХТС; ограничения на параметры функционирования элементов ХТС.

Необходимо определить: состав ХТС (входящие в ХТС аппараты); структуру ХТС (связи между аппаратами); конструктивные параметры аппаратов ХТС; текущие технологические параметры работы ХТС; параметры управления ХТС, удовлетворяющие оптимальным параметрам функционирования ХТС.

При решении задачи синтеза ХТС, первоначально должен быть определён путь проведения процесса (химизм), и только затем становится возможным произвести синтез структуры ХТС, определение параметров работы её элементов и параметров потоков, связывающих эти элементы. В связи с тем, что задача синтеза является сложной многовариантной задачей, её решение возможно только при использовании определённой методологии и соответствующих подходов.

Самым простым способом синтеза может являться метод, основанный на принципах перебора вариантов топологии ХТС, параметров функционирования элементов и т.д. Однако в связи со сложностью ХТС и многовариантностью решения отдельных задач синтеза (взаимного соединения реакторов, теплообменников и т.п.) данный способ будет требовать большого количества дополнительной информации и времени, что может быть недостаточно эффективно. Например, хорошо известно, что самопроизвольно тепло может передаваться только от горячего потока к холодному, следовательно, схему предполагающую обратное можно не рассматривать. Однако в случае простого перебора различных вариантов, параметры функционирования элементов могут быть определены только после синтеза *топологии* ХТС и составления её математической модели, необходимой для расчёта, и самого расчёта. Следовательно, в *данном* случае, даже неосуществимые варианты будут требовать рассмотрения, а, следовательно, дополнительных затрат.

Для снижения количества рассматриваемых вариантов обычно проводят декомпозицию задачи синтеза ХТС на ряд подзадач или уровней (декомпозиционный метод синтеза ХТС). При использовании более простой – двухуровневой декомпозиции, на верхнем уровне будет происходить синтез ХТС из подсистем (химического взаимодействия, разделения, *смешения* и пр.) и определяться значения параметров потоков, связывающих эти подсистемы. На нижнем уровне будет производиться синтез самих подсистем и определяться значения параметров потоков, связывающих аппараты, входящие в данные подсистемы. В данном случае, если вариант какой-либо синтезированной схемы при её расчёте окажется неосуществимым, затраты на синтез, анализ, моделирование и расчёт варианта ХТС будут меньше. Однако даже задача синтеза подсистем является достаточно сложной и требует дополнительных декомпозиций или применения других методов синтеза.

Порядок многоуровневой декомпозиция задачи синтеза ХТС:

1. Выбор маршрутов и условий проведения реакций.
2. Определение оптимальных систем химических реакторов.
3. Определение оптимальных систем разделения смесей.
4. Выбор вспомогательных подсистем.
5. Определение оптимальных систем теплообменников.
6. Качественный анализ надёжности ХТС.
7. Анализ динамических свойств ХТС.

К принципам, позволяющим более эффективно решить задачу синтеза ХТС методом декомпозиции, можно отнести эвристический принцип синтеза ХТС, который заключается в математической формализации интуитивно-эвристического метода, широко используемого проектировщиками и позволяющего высококвалифицированным специалистам интуитивно выбирать наиболее удачные варианты решения проблемы без полного перебора всех возможных альтернативных вариантов. При использовании *данного* метода принятие решения происходит без обоснования его с помощью доказательств. Однако данный способ принятия решений не снижает его ценности, так как он использует интуитивные факторы и правила, т.е. обобщающие знания и большой практический опыт высококвалифицированных специалистов.

Рассмотрим некоторые эвристики, применяемые при разработке технологических схем ряда функциональных подсистем химических производств. Например, для выбора оптимальной технологической схемы разделения многокомпонентных смесей из множества альтернативных вариантов можно использовать следующие эвристики:

- выбор варианта с последовательным выделением целевых продуктов в виде лёгких продуктов элементов подсистемы;
- выбор варианта, в котором отношение количеств верхнего и нижнего продуктов в каждом элементе подсистемы наиболее близко к 1;
- выбор варианта, в котором разделение компонентов осуществляется в порядке уменьшения различий в значениях относительных *летучестей* разделяемых ключевых компонентов;
- ректификационные колонны, требующие наибольших затрат на разделение вследствие близких относительных летучестей ключевых компонентов или высоких требований к чистоте продуктов, должны быть помещены в конце схемы разделения;
- выбор варианта, характеризующегося минимальной величиной приведённых затрат на реализацию данного технологического процесса в элементе подсистемы и т.д.

При разработке оптимальных технологических схем тепловых подсистем (систем теплообменников) могут использоваться следующие эвристики:

- выбирается пара потоков, для которой количество передаваемого тепла является максимальным;
- выбирается пара потоков, для которой заданные конечные температуры потоков не достигнуты, а стоимость использования вспомогательных теплоносителей для доведения температуры этих потоков до заданных конечных значений является минимальной;
- выбирается пара потоков, стоимость нагрева/охлаждения которых вспомогательными теплоносителями является максимальной;
- выбирается пара потоков, для которой стоимость теплообмена является минимальной и т.д.

При применении эвристического принципа синтеза успех в основном зависит от того, насколько близки эвристические условия к условиям достижения оптимальности рассматриваемой подсистемы ХТС, а также от порядка применения эвристических условий, типа синтезируемой подсистемы, её сложности, параметров потоков и пр. Для определения данного порядка применения эвристик используют весовые функции отдельных эвристик.

В качестве примера рассмотрим представленный в литературе [1] пример синтеза системы теплообменников, обеспечивающей нагрев и охлаждение технологических потоков до заданных температур.

Как и для любой технологической схемы в примере используются следующие ограничения:

- технологическая схема должна максимально использовать энергию самих потоков («холодные» потоки должны по возможности нагреваться «горячими» потоками);
- технологические потоки нельзя разделять, однако, если разделение технологического потока необходимо, то разделяемые части потока должны быть рассмотрены как отдельные потоки;
- синтезируемая тепловая схема должна иметь минимальные затраты на реализацию заданной операции теплообмена между потоками;
- в случае, если для нагрева/охлаждения потоков невозможно или невыгодно использовать другие потоки, могут быть использованы внешние теплоносители: насыщенный пар с давлением 31,6 кгс/см<sup>2</sup> и охлаждающая вода с температурой 38 °С, причём, воду нельзя нагревать выше 82 °С;
- при теплообмене между технологическими потоками, охлаждении их водой и нагреве паром, соответственно, достигаются следующие коэффициенты теплопередачи: 852, 852, 1136 Вт/м<sup>2</sup>·К;
- при теплообмене между технологическими потоками, охлаждении их водой и нагреве паром, соответственно, минимальное сближение температур обрабатываемых температур в теплообменнике составляет 11, 11 и 13 °С.

Исходные параметры технологических потоков представлены в табл. 6.1.

Таблица 6.1

№ потока	Расход, т/ч	Начальная T, °С	Конечная T, °С	Теплоёмкость, ккал (кг·К)
1	20	100	430	0,80
2	40	440	150	0,70
3	35	520	300	0,68
4	36	180	350	0,91
5	31	200	400	0,85
6	32	350	410	0,62
7	42	390	150	0,80

В соответствии с методологией применения эвристического принципа порядок синтеза тепловой схемы (ХТС) будет следующий:

1. Всё множество потоков разделяется на подмножества, подлежащих нагреву (поток 1, 4, 5 и 6) и охлаждению (поток 2, 3 и 7). Всем эвристикам (будут использоваться описанные выше эвристики) присваиваются весовые коэффициенты, равные 0,5.
2. Перебором потоков обоих подмножеств определяется возможность осуществления операций теплообмена (т.е. сначала потока 1 с потоками 2, 3, 7, затем потока 4 с потоками 2, 3, 7 и т.д.). Пары потоков, для которых теплообмен возможен, заносятся в таблицу пар обрабатываемых потоков.
3. При помощи эвристики, выбранной с учётом весовых коэффициентов, из таблицы пар обрабатываемых потоков выбирается одна пара и для неё производится расчёт теплообменника, т.е. рассчитываются конечные температуры потоков.
4. Если рассчитанные конечные температуры потоков соответствуют заданным конечным температурам, то эти потоки вычеркиваются из списков. В противном случае потоки, имеющие рассчитанные конечные температуры, заносятся в таблицы в качестве оставшихся необработанных потоков.
5. Пункты 2 – 5 повторяются до тех пор, пока не будут исчерпаны все пары обрабатываемых потоков.
6. Оставшиеся потоки, не достигшие конечных температур, подвергаются нагреву/охлаждению вспомогательными потоками. Рассчитываются приведённые затраты на реализацию синтезированной схемы.
7. Рассчитанная с помощью какой-либо методики величина приведённых затрат сравнивается с минимальным значением, полученным ранее (первоначальная стоимость системы теплообменников рассчитывается для системы, в которой нагрев

и охлаждение проводятся только вспомогательными потоками воды и пара). Если полученное решение получится более экономичным, то весовые коэффициенты использованных эвристик увеличиваются, в противном случае – уменьшаются. Если весовой коэффициент эвристики будет равен нулю, то данная эвристика далее не используется.

Процесс синтеза ХТС ведут до тех пор, пока снижается приведённая стоимость затрат. При стабилизации приведённой стоимости затрат на некотором минимальном значении расчёты прекращают. Синтезированная операторная схема системы теплообмена (для данного примера) представлена на рис. 6.1.

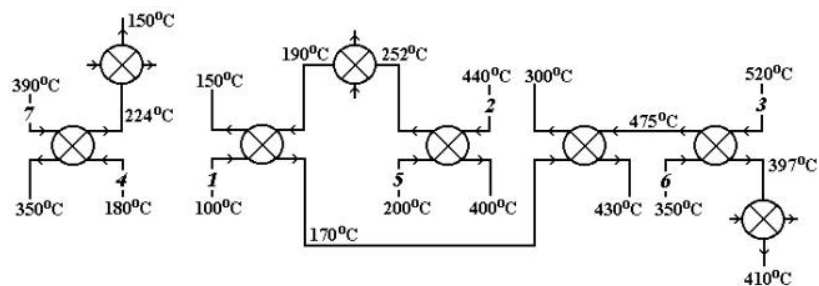


Рис. 6.1. Операторная схема синтезированной системы теплообмена  
Снижение приведённых затрат в процессе синтеза тепловой схемы представлено на рис. 6.2.

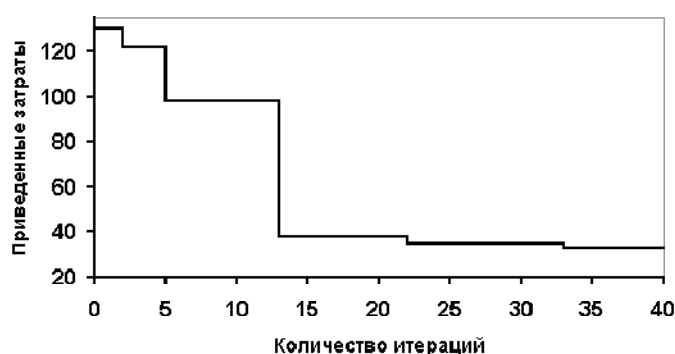


Рис. 6.2. Изменение приведенных затрат в процессе синтеза тепловых схем

Как видно из рисунков, синтезированная тепловая схема имеет минимальные приведённые затраты и состоит из восьми теплообменников, пять из которых передают теплоту от охлаждающихся потоков к нагревающимся, и только в три теплообменника подаётся внешний хладагент.

Рассмотренные принципы синтеза ХТС достаточно широко применяются при синтезе новых производств, однако, при реконструкции существующих производств, применение данных принципов приведёт к рассмотрению избыточного количества вариантов и может быть недостаточно эффективно. Для целей модернизации существующей технологической схемы, а также и для синтеза новых ХТС может использоваться эволюционный принцип синтеза.

Методологическая основа эволюционного принципа синтеза ХТС заключается в последовательной модификации аппаратного оформления и коррекции структуры технологических связей некоторого исходного варианта ХТС с использованием методов эвристики и оптимизации. Иным образом, при использовании эволюционного принципа синтеза ХТС сначала создаётся исходный вариант технологической топологии ХТС, например, с помощью эвристического принципа синтеза. С помощью методов анализа для данного варианта находится «узкое» место ХТС, определяется критерий оптимальности и производится соответствующая модификация аппаратного оформления и структуры технологических связей. После указанной модификации снова производится расчёт критерия оптимальности и новый поиск «узкого» места ХТС. Процесс модификации ХТС производится до тех пор, пока не будет достигнуто требуемое значение критерия оптимальности. Таким образом, логически, этот процесс состоит из последовательного итерационного чередования этапов синтеза, анализа, оптимизации и модификации некоторого первоначально заданного технологического решения задачи синтеза ХТС или существующей технологической схемы.

Таким образом, практическая реализация эволюционного принципа синтеза связана с необходимостью использования следующих типов эвристик: эвристики, обобщающие практический опыт (позволяющие выделить наименее эффективные элементы или узкие места в исходном варианте технологической топологии ХТС); интуитивные эвристики (позволяющие определить возможные варианты модификации или усовершенствования узких мест ХТС); эвристики, базирующиеся на знаниях высококвалифицированных специалистов (обеспечивающие возможность «стыковки» модифицированного элемента ХТС с немодифицированной частью ХТС).

В заключение, следует отметить, что, к сожалению, использование эволюционного принципа синтеза ХТС позволяет с наибольшей эффективностью получить локальные оптимальные результаты, что обусловлено тем, что результат решения в значительной мере определяется принятыми на первом этапе основными концепциями при разработке исходного варианта технологической топологии ХТС.

7. Основные методы расчёта  
Химико-технологических Систем.  
Интегральные и декомпозиционные методы  
расчёта Химико-технологических Систем

Основной задачей расчёта ХТС при заданных параметрах функционирования технологических *операторов* является нахождение *параметров состояния* потоков, связывающих указанные технологические *операторы*. Методы решения этой задачи обычно разделяют на две группы: интегральные (они еще называются композиционными) и декомпозиционные. В свою очередь, в зависимости от принципов построения моделей, каждый из методов имеет различные способы расчётов.

Суть интегральных методов расчёта ХТС заключается в объединении систем уравнений, описывающих работу отдельных *аппаратов*, в одну большую систему уравнений с дальнейшим решением этой системы. При декомпозиционном методе расчёта ХТС представляется в виде отдельных блоков, соответствующих элементам ХТС, и расчёт ХТС сводится к последовательному расчёту отдельных блоков. В *данном* случае размерность каждой отдельной системы уравнений, соответствующей блоку ХТС, относительно невелика. Сравним характеристики интегрального и декомпозиционного методов расчёта ХТС.

Как было указано выше, суть интегрального метода заключается в объединении систем уравнений, описывающих работу отдельных *аппаратов*, в одну большую систему уравнений с дальнейшим решением этой системы. Таким образом, линейные уравнения материального и теплового балансов объединяются с нелинейными уравнениями *равновесия химических реакций* дифференциальными линейными и нелинейными уравнениями, уравнениями гидродинамики в частных производных и т.д. в единую «большую» систему уравнений, например, в общем виде:

$$\begin{cases} \sum G_i = 0 - \text{материальный баланс;} \\ \sum Q_i = 0 - \text{тепловой баланс;} \\ \frac{dX_i}{dt} = kC_A^m C_B^n - \text{кинетика химических реакций;} \\ \frac{\partial Y_i}{\partial Z} = f(\text{Re, Pr, Ag и т.д.}) - \text{гидродинамика.} \end{cases}$$

Данная система уравнений содержит множество уравнений различного типа от линейных до дифференциальных уравнений в частных производных. Такие системы уравнений называются смешанными и требуют специальных математических методов для своего решения. Более того, в зависимости от типа уравнений (сложность которых определяется типом модулей) методы решения системы уравнений могут иметь чисто математические ограничения и требовать специального представления задачи. Это приведёт к тому, что для конкретной ХТС должна составляться уникальная система уравнений. В связи со сложностью, система уравнений может быть трудноразрешима, и потребовать применения специальных математических методов. Следовательно, перед использованием интегрального метода необходимо, с математической точки зрения, предварительно проанализировать математические зависимости, лежащие в основе модулей ХТС.

Таким образом, для использования интегрального метода проектировщику необходимо иметь достаточно серьёзную математическую подготовку и специальные компьютерные программы для решения смешанных систем уравнений (линейных, нелинейных, дифференциальных, в частных производных и др.). Однако даже в этом случае, с целью оперативного получения результатов расчёта, интегральный способ расчёта можно рекомендовать только для простых ХТС или для ХТС, где необходимо рассчитать только материальные балансы без учёта кинетики, термодинамики и т.д. (т.е. решить линейную систему уравнений).

Суть декомпозиционного метода расчёта заключается в том, что ХТС представляется в виде отдельных блоков, соответствующих элементам ХТС. Расчёт ХТС сводится к последовательному расчёту отдельных блоков. В этом случае при расчёте отдельного модуля требуется рассчитать только ограниченное количество уравнений, соответствующих конкретному модулю, т.е. выполнить проверочный расчёт конкретного процесса. Следует отметить, что при наличии ограниченного количества возможных модулей ХТС, их алгоритмы расчёта давно разработаны и приведены в специальной литературе и в виде компьютерных программ (данные алгоритмы также преподавались в курсе «Моделирование ХТП»). Именно поэтому, вследствие своей универсальности, наибольшее распространение, как при расчёте сложных, так и простых ХТС, получил декомпозиционный способ расчёта.

Как известно, большинство ХТС имеет рециркуляционные соединения, образующие замкнутую ХТС, непосредственный расчёт которой с помощью декомпозиционного принципа невозможен. Для решения таких систем их структуру сначала необходимо привести к разомкнутому виду и только затем производить расчёт с использованием декомпозиционного способа расчёта. Однако не смотря на то, что теория и алгоритмы анализа структуры ХТС с целью определения оптимального множества разрываемых связей, с целью перевода структуры из замкнутого к разомкнутому виду и нахождения оптимальной последовательности расчёта ХТС, достаточно хорошо разработаны, каждая ХТС сама по себе уникальна. В связи с этим, в конкретном случае могут возникнуть проблемы нахождения оптимального множества разрываемых связей и оптимальной последовательности расчёта декомпозиционным способом.

Существуют разновидности декомпозиционного способа расчёта замкнутых ХТС, наиболее простым из которых является итерационный способ расчёта. Рассмотрим итерационный способ расчёта замкнутых ХТС на примере простейшей схемы, представленной на рис. 7.1.

Как видно на рис. 7.1, а, простейшая замкнутая ХТС состоит из двух модулей (*A* и *B*), связанных четырьмя технологическими связями,

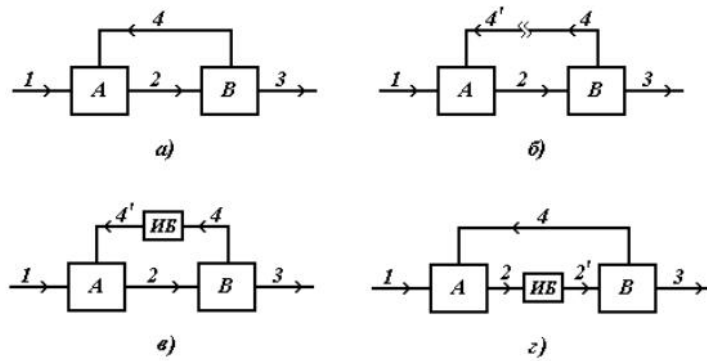


Рис. 7.1. Иллюстрация итерационного способа расчёта ХТС

из которых связь  $4$  является рециркуляционной. Исходя из исходной задачи расчёта ХТС, исходными данными для расчёта указанной ХТС будут параметры функционирования элементов  $A$  и  $B$ , а также параметры входящего в ХТС потока  $1$ . Однако провести расчёт модуля  $A$  с целью получения параметров потока  $2$  невозможно, так как неизвестны параметры потока  $4$ . Расчёт модуля  $B$  произвести также невозможно, так как неизвестен поток  $2$ , входящий в этот модуль. Таким образом, непосредственное применение декомпозиционного способа расчёта этой замкнутой ХТС невозможно.

Для того чтобы декомпозиционный способ можно было применить, необходимо привести ХТС из замкнутого вида к разомкнутому. Для этого, в случае указанной ХТС, можно «разорвать» любой поток, входящий в рецикл, т.е. поток  $2$  или  $4$ . В случае разрыва потока  $4$  (рис. 7.1, б), выходящего из модуля  $B$  и входящего в модуль  $A$ , образуется новый входящий в ХТС и в модуль  $A$  поток  $4'$ . В связи с тем, что деление потока на  $4$  и  $4'$  является условным (применяемым только для цели перевода структуры ХТС из замкнутого к разомкнутому виду), то при применении итерационного способа расчёта в место разрыва помещается дополнительный модуль – итерационный блок (ИБ) (рис. 7.1, в). В этом случае, исходя из исходной задачи расчёта ХТС, исходными данными для расчёта указанной ХТС будут являться параметры функционирования элементов  $A$  и  $B$ , а также параметры входящих потоков  $1$  и  $4'$ . Первоначальные параметры потока  $4'$  могут определяться с применением какого-либо алгоритма расчёта и на основании заданных исходных данных.

С указанным набором исходных данных появляется возможность выполнить первый расчёт ХТС, т.е. определить параметры потока  $2$ , зная которые, рассчитать параметры потоков  $3$  и  $4$ . В данном случае, параметры потока  $4$  будут отличаться от параметров потока  $4'$ , поэтому итерационный блок, проанализировав оба набора данных (потоков  $4$  и  $4'$ ), рассчитает суммарную погрешность и присвоит новые значения параметров потока  $4'$ . Так как новые значения потока  $4'$  будут формироваться итерационным блоком с учётом расчётных параметров потока  $4$ , то при выполнении второго расчёта ХТС, суммарная погрешность будет меньше, чем при первом расчёте. Далее, циклические расчёты (итерации) проводятся до тех пор, пока значения суммарной погрешности не будут ниже требуемой точности расчёта.

Итерационный метод расчёта ХТС обычно применяется для расчёта относительно простых ХТС, так как применение данного метода для сложных ХТС является не достаточно эффективным, так как предусматривает последовательные приближения искомым параметрам потоков. В связи с тем, что элементы ХТС, исходя из их физико-химической природы, могут функционировать лишь в заданных интервалах изменения параметров, применение итерационного метода иногда может быть невозможно, так как в процессе сходимости этого математического метода, значения технологических параметров могут выйти за пределы функционирования элементов ХТС. При расчёте ХТС, имеющей несколько разрываемых потоков (наличие нескольких рециклов), применение итерационного метода вообще может быть достаточно проблематично, так как вследствие наличия технологических связей итерационные процессы будут взаимосвязаны, что негативно повлияет на достижение решения для всей системы.

При расчёте сложных ХТС, имеющих несколько разрываемых потоков, обычно применяются методы многомерной минимизации суммарной погрешности, описанные в специальной литературе (например [9]). Суть этих методов заключается в том, что в отличие от итерационного метода, искомые значения параметров потоков рассчитываются при проведении расчёта с помощью специальных математических методов с ограничениями, наличие которых не позволяет выйти за пределы функционирования технологических операторов (в процессе нахождения решения), что позволяет достичь сходимости намного быстрее и надёжнее.

Как было указано выше, рецикл можно привести из замкнутого вида к разомкнутому путём разрыва одной из технологических связей, входящих в рецикл. На рис. 7.1, г представлен вариант разрыва потока  $2$ . В этом случае, имея начальные приближения параметров потока  $2'$ , сначала будет рассчитываться модуль  $B$  с определением параметров потоков  $3$  и  $4$ , а затем модуль  $A$  с определением параметров потока  $2$ . В отличие от предыдущего варианта, итерации будут проводиться по параметрам потока  $2$ , а не потока  $4$ . Вопросы выбора оптимальных вариантов перевода ХТС из замкнутого к разомкнутому виду будут рассмотрены далее.

Сравнение особенностей интегрального и декомпозиционного методов расчёта ХТС представлены в табл. 7.1.

Таблица 7.1

Интегральный метод	Декомпозиционный метод
Способ представления задачи	
Глобальная система уравнений	Отдельные моделирующие блоки,

стыкующиеся с помощью координирующей программы

Продолжение табл. 4.1

Интегральный метод	Декомпозиционный метод
Способ решения задачи	
Совместное решение уравнений	Последовательный расчёт с использованием итерационного метода расчёта, и с предварительным анализом ХТС для выявления оптимальной последовательности расчёта ХТС
Достоинства	
Возможность проведения расчёта для любого набора неизвестных переменных	Меньшее количество вычислений, наглядность
Недостатки	
Большая размерность единой системы уравнений наряду с отсутствием надёжных методов решения смешанных систем линейных, нелинейных и дифференциальных уравнений большой размерности. Уникальность каждой системы уравнений	Трудность построения оптимального алгоритма расчёта ХТС
Рекомендации	
Применять только при расчётах упрощённых ХТС	Применять для расчёта ХТС произвольной сложности

#### 8. Представление Химико-Технологической Системы в виде графов, матриц и таблиц

При рассмотрении основных методов расчёта ХТС было показано, что декомпозиционный метод расчёта имеет ряд преимуществ и может использоваться для расчёта ХТС произвольной сложности. Однако в этом случае при расчёте замкнутой ХТС возникают проблемы с определением оптимальной последовательности расчёта. Так как ХТС замкнутая, то произвести её непосредственный расчёт без перевода из замкнутого в разомкнутый вид – невозможно, поэтому в данном случае следует говорить об определении оптимального множества разрываемых потоков, позволяющих с минимальным количеством вычислений рассчитать ХТС произвольной сложности.

Применительно к ХТС произвольной сложности, перед её расчётом необходимо решить следующие задачи:

- определить наличие в ХТС групп *аппаратов*, рассчитываемых совместно (комплексов) и выделить эти комплексы;
- определить предварительную последовательность расчёта комплексов и *аппаратов*, не входящих в комплексы;
- для каждого комплекса определить оптимальное множество разрываемых потоков и последовательность расчёта комплекса;
- определить окончательную последовательность расчёта всей ХТС.

Совокупность указанных задач и называется анализом структуры ХТС.

Структуру ХТС обычно рассматривают в терминах теории графов, т.е. в виде ориентированного графа, вершины которого соответствуют аппаратам, а дуги – потокам (например, так, как на рис. 8.1). На рис. 8.1 номера вершин обозначены большим курсивом (справа сверху от вершины), а номера потоков – малым прямым шрифтом (под линией соответствующего потока).

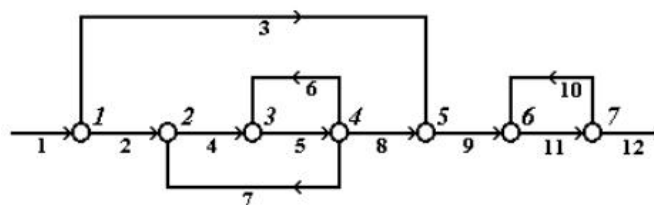


Рис. 8.1. Представление ХТС в виде ориентированного графа

Теория графов – это область конечной математики, изучающая дискретные структуры, называемые графами; применяется для решения различных теоретических и прикладных задач.



Граф – совокупность точек (вершин) и совокупность пар этих точек (не обязательно всех), соединённых линиями. Если на графе линии ориентированы (т.е. стрелками показано направление связи вершин), они называются дугами, или ветвями; если неориентированы – рёбрами. Соответственно, граф, содержащий только дуги, называется ориентированным, или орграфом; только рёбра – неориентированным; дуги и рёбра – смешанным. Граф, имеющий кратные рёбра, называется мультиграфом; граф, содержащий только рёбра, принадлежащие двум его непересекающимся подмножествам (частям), – двудольным; дуги (рёбра) и (или) вершины, которым отвечают определённые веса или числовые значения параметров – взвешенным. Путь в графе – чередующаяся последовательность вершин и дуг, в которой ни одна из вершин не повторяется (например  $a, b$  на рис. 8.2,  $a$ ); контур – замкнутый путь, в котором первая и последняя вершины совпадают (рис. 8.2,  $f, h$ ); петля-дуга (ребро), которая начинается и кончается в одной и той же вершине. Цепь графа – последовательность рёбер, в которой ни одна из вершин не повторяется (рис. 8.2,  $c, d, e$ ); цикл – замкнутая цепь, в которой её начальная и конечная вершины совпадают. Граф называется связным, если любая пара его вершин соединена цепью или путём; в противоположном случае граф называется несвязным.

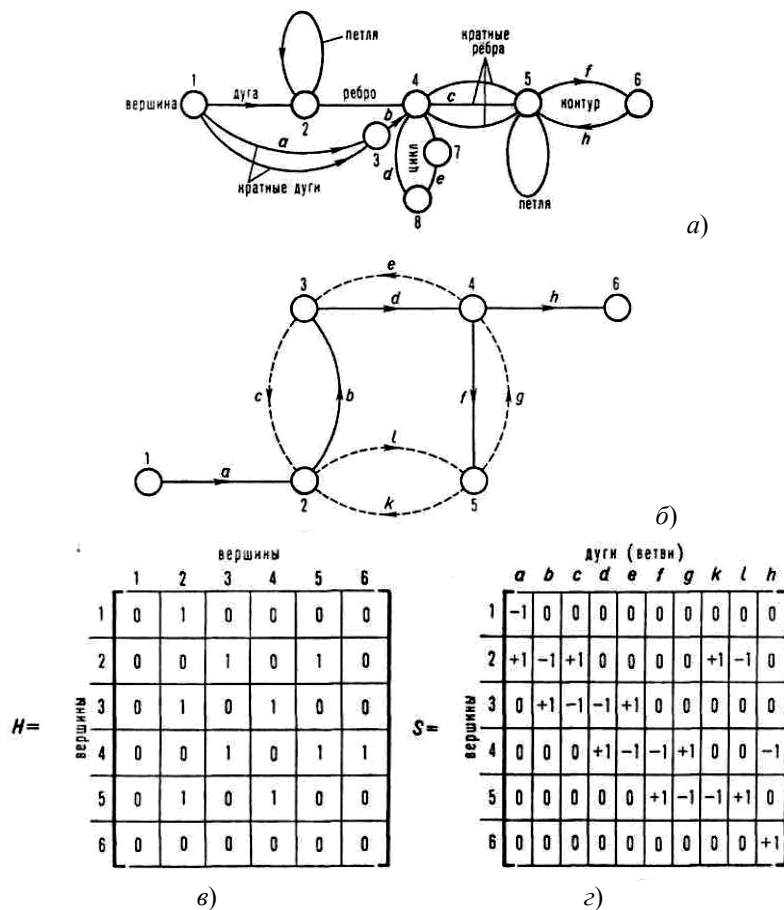


Рис. 8.2. Иллюстрация некоторых основных понятий:  
 $a$  – смешанный граф;  $b$  – основное дерево (сплошные дуги  $a, h, d, f, h$ ) и некоторый подграф (пунктирные дуги  $c, c, g, k, l$ ) орграфа;  $v, z$  – матрицы соответственно смежности и инцидентности орграфа

Дерево-связный неориентированный граф, не содержащий циклов или контуров (рис. 8.2,  $b$ ). Остовый подграф некоторого графа – его подмножество, содержащее все вершины и лишь определённые рёбра. Основное дерево некоторого графа – его основной подграф, представляющий собой дерево. Графы называются изоморфными, если существует взаимно однозначное соответствие между совокупностями их вершин и рёбер (дуг).

Для решения задач графы представляют с помощью матриц (смежности, инцидентности, двустрочных и др.), а также специальных числовых характеристик. Например, в матрице смежности (рис. 8.2,  $v$ ) строки и столбцы отвечают номерам вершин графа, а её элементы принимают значения 0 и 1 (соответственно, отсутствие и наличие дуги между данной парой вершин); в матрице инцидентности (рис. 8.2,  $z$ ) строки отвечают номерам вершин, столбцы – номерам дуг, а элементы принимают значения 0, +1 и -1 (соответственно, отсутствие и наличие дуги, входящей в вершину и выходящей из неё). Наиболее употребительные числовые характеристики: число вершин, число дуг или рёбер ( $n$ ), цикломатическое число, или ранг графа ( $n - m + k$ , где  $k$  – число связных подграфов в несвязном графе; например, для графа на рис. 8.2,  $b$  ранг будет:  $10 - 6 + 1 = 5$ ).

Применение теории графов базируется на построении и анализе различных классов химических и химико-технологических графов. Дуги (рёбра) и вершины этих графов отображают химические и химико-технологические понятия, явления, процессы или объекты и, соответственно, качественные и количественные взаимосвязи, либо определённые отношения между ними. Химические графы дают возможность прогнозировать химические превращения, пояснять сущность и систематизировать некоторые основные понятия химии: структуру, конфигурацию, конформации, квантовомеханическое и

статистико-механическое взаимодействия молекул, изомерию и др. К химическим графам относятся молекулярные, двудольные и сигнальные графы кинетических уравнений реакций. Молекулярные графы (применяемые в стереохимии и структурной топологии, химии кластеров, полимеров и др.) представляют собой неориентированные графы, отображающие строение молекул (рис. 8.3) и возможных химических реакций (рис. 8.4). Вершины и рёбра этих графов соответствуют атомам и химическим связям между ними.

Молекулярные графы дают возможность сводить задачи, связанные с кодированием, номенклатурой и структурными особенностями (разветвлённость, цикличность и т.п.) молекул различных соединений, к анализу и сопоставлению чисто математических признаков и свойств графов и их деревьев, а также соответствующих им матриц.

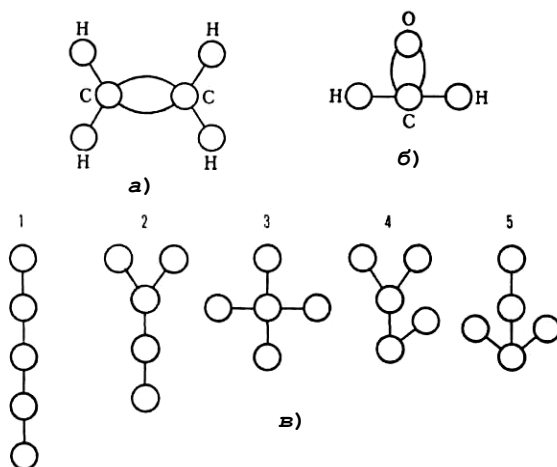


Рис. 8.3. Молекулярные графы и деревья:  
*a, б* – мультиграфы этилена и формальдегида;  
*в* – мультиграфы изомеров пентана (деревья 4, 5 изоморфны дереву 2)

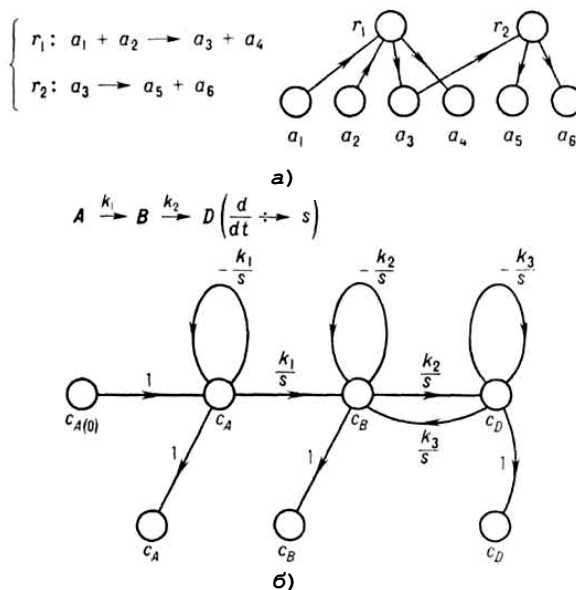


Рис. 8.4. Графы реакций:  
*a* – двудольный; *б* – сигнальный уравнений кинетики;  
 $r_1, r_2$  – реакции;  $a_1 - a_6$  – реагенты;  $k$  – константы скорости реакций;  
 $s$  – комплексная переменная преобразования Лапласа

С применением теории графов и принципов искусственного интеллекта разработано программное обеспечение информационно-поисковых систем в химии, а также автоматизированные системы идентификации молекулярных структур и рационального планирования органического синтеза.

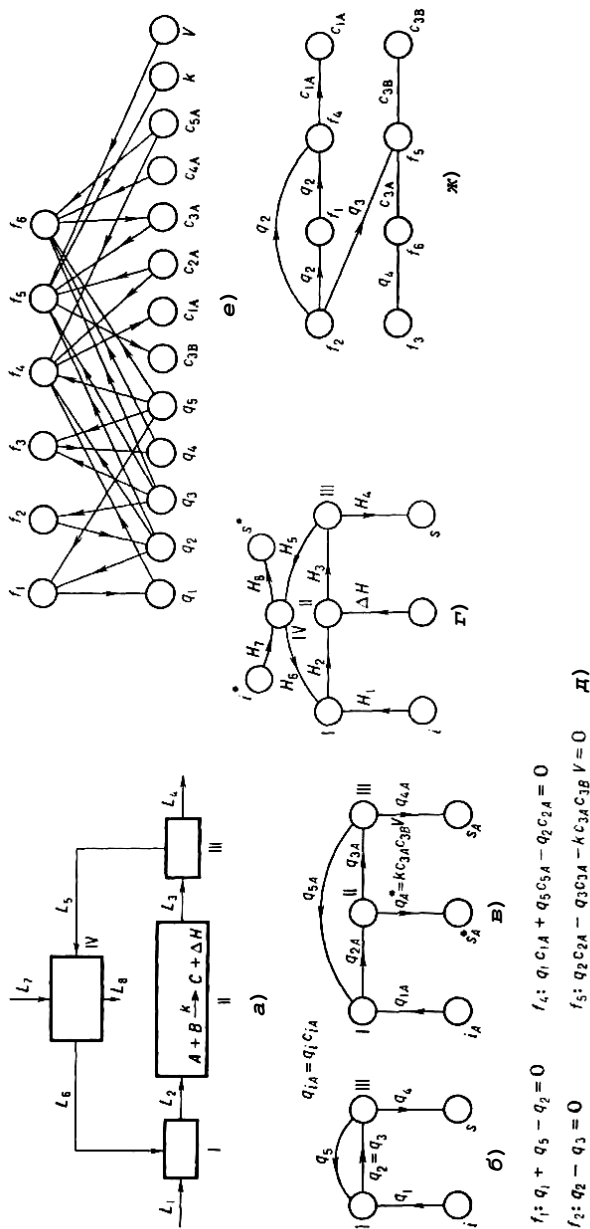
Для выбора рациональных путей превращения молекул реагентов при заданном множестве известных взаимодействий используют двудольные графы реакций (вершины соответствуют молекулам и этим реакциям, дуги – взаимодействию молекул в реакции; рис. 8.4, *a*). Такие графы позволяют разрабатывать диалоговые алгоритмы выбора оптимальных путей химических превращений, для которых требуется наименьшее число промежуточных реакций, минимальное число реагентов из перечня допустимых или достигается наибольший выход продуктов.

Сигнальные графы уравнений кинетики реакций отображают системы кинетических уравнений, представленных в алгебраическо-операторной форме (рис. 8.4, *б*). Вершины графов отвечают информационным переменным, или сигналам, в виде концентраций реагентов, дуги – взаимосвязям сигналов, причём веса дуг определяются кинетическими константами.

Такие графы применяют при изучении механизмов и кинетики сложных каталитических реакций, сложных фазовых равновесий при образовании комплексных соединений, а также для расчёта параметров аддитивных свойств растворов.

Для решения многомерных задач анализа и оптимизации химико-технологических систем используют химико-технологические графы (рис. 8.5): потоковые, информационно-потоковые, сигнальные и графы надёжности. К потоковым графам, представляющим собой взвешенные орграфы, относятся параметрические, материальные по общим массовым расходам физических потоков и массовым расходам некоторых химических компонентов либо элементов, а также тепловые графы. Перечисленные графы соответствуют физико-химическим превращениям веществ и энергии в данной ХТС.

Параметрические потоковые графы отображают преобразование параметров (массовых расходов и др.) физических потоков элементами ХТС; вершины графов отвечают математическим моделям аппаратов, а также источникам и стокам указанных потоков, а дуги – самим потокам, причём веса дуг равны числу параметров соответствующего потока. Параметрические графы служат для разработки алгоритмов анализа технологических режимов многоконтурных ХТС. Такие алгоритмы устанавливают последовательность расчёта систем уравнений математических моделей отдельных аппаратов системы для определения параметров её выходных потоков при известных значениях их переменных.



**Рис. 8.5. Одноконтурная химико-технологическая система и соответствующие графы:**  
*a* – структурная схема; *б, в* – материальные потоковые графы, соответственно по общим массовым расходам и расходу компонента *A*; *г* – тепловой потоковый граф; *д* – фрагмент системы уравнений ( $f_1 - f_6$ ) материального баланса, полученной из анализа графов *б* и *в*; *е* – двудольный информационный орграф; *ж* – информационный граф; *I* – реактор; *II* – ректификационная колонна; *IV* – холодильник;  $I_1 - I_8$  – технологические потоки;  $q$  – массовый расход;  $H$  – энтальпия потока;  $i, s$  и  $i^*, s^*$  – соответственно, реальные и фиктивные источники и стоки материальных и тепловых потоков;  $c$  – концентрация реагента;  $V$  – объём реактора

Материальные потоковые графы отображают изменения расходов веществ в ХТС. Вершины графов отвечают аппаратам, в которых трансформируются общие массовые расходы физических потоков и массовые расходы некоторых химических компонентов или элементов, а также источникам и стокам веществ потоков либо данных компонентов; соответственно, дуги графов отвечают физическим потокам или физическим и фиктивным (химические превращения веществ в аппаратах) источникам и стокам компонентов, а веса дуг равны массовым расходам обоих типов. Тепловые потоковые графы отображают балансы теплоты в ХТС; вершины графов соответствуют аппаратам, в которых изменяются расходы теплоты физических потоков, и, кроме того, источникам и стокам тепловой энергии системы; дуги отвечают физическим и фиктивным (физико-химическим превращения энергии в аппаратах) тепловым потокам, а веса дуг равны энтальпиям потоков. Материальные и

тепловые графы используют для составления программ автоматизированной разработки алгоритмов решения систем уравнений материальных и тепловых балансов сложных ХТС.

Информационно-потокковые графы отображают логико-информационную структуру систем уравнений математических моделей ХТС; применяются для составления оптимальных алгоритмов расчёта этих систем. Сигнальные графы соответствуют линейным системам уравнений математических моделей химико-технологических процессов и систем. Вершины графов отвечают сигналам (например температуре), ветви – связям между ними. Такие графы используют для анализа статических и динамических режимов многопараметрических процессов и ХТС, а также показателей ряда их важнейших свойств (устойчивости, чувствительности, управляемости).

Графы надёжности применяют для расчёта различных показателей надёжности ХТС. Среди многочисленных групп этих графов (например параметрических, логико-функциональных) особенно важны так называемые деревья отказов. Каждое такое дерево – это взвешенный орграф, отображающий взаимосвязь множества простых отказов отдельных процессов и аппаратов ХТС, которые приводят к множеству вторичных отказов и результирующему отказу системы в целом.

Последовательность сцеплённых дуг, позволяющая пройти от одной вершины к другой, называется путём. Путь можно обозначить как через последовательность дуг, так и через последовательность вершин. Путь, начальная вершина которого совпадает с конечной, причём каждая вершина, за исключением начальной, проходится только один раз, называется контуром. Например, на рис. 8.1 имеются три контура (по вершинам): 2–3–4–2, 3–4–3 и 6–7–6.

Комплексом называется часть графа, вершины которого обладают следующими свойствами:

- каждая из вершин и дуг комплекса входит в один из контуров графа;
- если вершина  $i$  входит в комплекс, то в этот комплекс входят также все вершины, входящие в контуры, которые содержат вершину  $i$ .

Например, на графе, представленном на рис. 8.1 имеются два комплекса (по вершинам): 2–3–4 и 6–7. В первый комплекс входят два контура (2–3–4–2 и 3–4–3), а во второй – один (6–7–6).

Представленная на рис. 8.1 схема движения материальных потоков (граф) является достаточно простой, поэтому позволяет проводить свой анализ без применения каких-либо программных продуктов. В случае более сложной схемы, проводить анализ становится затруднительно, так как при поиске оптимального множества разрываемых потоков комплексов необходимо проводить анализ достаточно большого количества информации и быстродействия. При использовании для анализа структуры ХТС специальных алгоритмов возникает проблема ввода в компьютер структурной схемы, т.е. её формализация в каком-либо числовом виде. В зависимости от выбранного способа анализа структуру ХТС обычно формализуют в виде матрицы смежности или в виде списка смежности.

Матрица смежности представляет собой двоичную таблицу, количество строк и столбцов которой равны количеству вершин графа. Для учёта входных и выходных потоков матрицу смежности добавляют нулевой строкой и столбцом, учитывая как нулевую вершину – окружающую среду. В случае, если между двумя вершинами есть связь, то элементу матрицы смежности, находящемуся на пересечении столбца и строки с соответствующими номерами вершин, присваивается значение «1», а в случае отсутствия связи – «0». Например, для графа, представленного на рис. 8.1 можно составить следующую матрицу смежности (рис. 8.6).

	0	1	2	3	4	5	6	7
0	0	1	0	0	0	0	0	0
1	0	0	1	0	0	1	0	0
2	0	0	0	1	0	0	0	0
3	0	0	0	0	1	0	0	0
4	0	0	1	1	0	1	0	0
5	0	0	0	0	0	0	1	0
6	0	0	0	0	0	0	0	1
7	1	0	0	0	0	0	1	0

Рис. 8.6. Матрица смежности

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
0	1	1	2	3	4	4	4	5	7	6	7
1	2	5	3	4	3	2	5	6	6	7	0

Рис. 8.7. Список смежности

В данном списке первая строка матрицы обозначает номер связи графа. Во второй строке указывается номер вершины, откуда указанная связь выходит, а в третьей – в какую вершину графа связь входит.

Кроме списка смежности, связи графа можно представить в таблицах связей. Например, для графа, представленного на рис. 8.1 таблицы связей будут выглядеть следующим образом (рис. 8.8).

Таблица А

1	2	5
2	3	
3	4	

Таблица В

1	0
2	1 4
3	2 4

4		2	3	5
5		6		
6		7		
7		6		

4		3		
5		1	4	
6		5	7	
7		6		

Рис. 8.8. Таблицы связей

Таблица А называется таблицей входных связей, а таблицу В – таблицей выходных связей. В первом столбце таблицы А указываются все вершины графа, а в последующих – номера вершин графа, куда идут связи из соответствующих номеров вершин, указанных в первом столбце таблицы. В таблице В указываются номера вершин графа, откуда идут связи в соответствующие номера вершин, указанные в первом столбце таблицы В. Модификацией А и В таблиц связи являются NA и NB таблицы связей (рис. 8.9), отличающихся от А и В таблиц тем, что в них указываются номера входящих и выходящих в заданную вершину связей.

Таблица NA				
1		2	3	
2		4		
3		5		
4		6	7	8
5		9		
6		11		
7		10	12	

Таблица NB				
1		1		
2		2	7	
3		4	6	
4		5		
5		3	8	
6		9	10	
7		11		

Рис. 8.9. Модифицированные таблицы связей

Из указанных способов формализации ХТС сложно выбрать один, так как все способы одинаково хорошо выполняют свои функции и могут использоваться без каких-либо ограничений для формализации и ввода в компьютер структуры ХТС любой сложности. Основным критерием выбора того или иного способа формализации ХТС является выбранный алгоритм поиска оптимального множества разрываемых связей с целью перевода ХТС из замкнутого в разомкнутый вид.

### *9. Детерминированные и статистические модели элементов Химико-Технологической системы*

Ранее было отмечено, что в связи с большей наглядностью, меньшим количеством вычислений и ограниченным количеством модулей, алгоритмы расчёта которых хорошо известны, наибольшее распространение получил декомпозиционный метод расчёта ХТС, заключающийся в последовательном расчёте ХТС от модуля к модулю.

Ввиду сложности технологических процессов при разработке их математических моделей обычно вводят ряд упрощающих допущений. Например, для описания структуры потока в аппарате часто используют два предельных режима: идеального вытеснения и идеального смешения. В качестве допущений может приниматься постоянство температуры или давления в определённой зоне аппарата, постоянство скорости потока или скорости химической реакции и т.д. При этом, структура и степень детализации математического описания для одноимённых модулей может быть различная, и зависит от целей их использования, объёма информации, положенной в основу модели, и других факторов.

Когда процесс достаточно сложен, его рассматривают как «чёрный ящик», т.е. анализируют только взаимосвязь входных и выходных параметров, не рассматривая физико-химические закономерности самого процесса. В этих случаях на основании экспериментальных данных с помощью статистических методов строят регрессионную модель процесса (зависимости выходных параметров от входных), адекватно описывающую реальный технологический объект на некотором интервале изменения его параметров. Таким образом, различают два типа моделей: детерминированные и статистические.

Детерминированные или физико-химические математические модели отражают закономерности процессов, протекающие в элементах ХТС. При разработке таких моделей используют законы сохранения массы и энергии, законы переноса вещества, энергии и импульса, закономерности кинетики протекающих химических реакций, гидродинамику потоков и т.д. При составлении математических моделей процессов используется блочный принцип построения моделей, согласно которому математическое описание объекта в целом получают как совокупность описаний отдельных элементарных процессов, протекающих в рассматриваемом объекте.

Построенную математическую модель проверяют на адекватность экспериментальным данным и в случае необходимости корректируют её параметры. Затем разрабатывают алгоритм решения уравнений и формируют модуль в виде соответствующей программы для компьютера.

В настоящее время существует специализированное программное обеспечение, содержащее в своих базах данных адекватные математические модели различных процессов. Более подробно такие программные продукты будут рассмотрены в следующих главах.

Статистические модели элементов ХТС не включают детальное описание закономерностей процессов, происходящих в моделируемых объектах. Обычно математическое описание элемента строится в виде регрессионных зависимостей выходных параметров объекта от входных переменных и представляет собой адекватные линейные и нелинейные полиномиальные уравнения. Коэффициенты этих уравнений находят путём обработки данных полного факторного или пассивного эксперимента, что позволяет значительно сократить трудоёмкость составления модели и все расчётные процедуры.

Рассмотрим способы построения детерминированных и статистических моделей элементов ХТС более подробно.

Как было сказано выше, детерминированные или физико-химические математические модели отражают теоретические

закономерности процессов, протекающие в элементах ХТС. При разработке таких моделей используют законы сохранения массы и энергии, законы переноса вещества, энергии и импульса, закономерности кинетики протекающих химических реакций, гидродинамику потоков и т.д. В связи со сложностью реальных технологических процессов, при разработке их математических моделей обычно вводят ряд допущений, упрощающих описание реального процесса и позволяющих применить блочный принцип построения моделей, согласно которому математическое описание объекта в целом получают как совокупность описаний отдельных элементарных процессов, протекающих в рассматриваемом объекте. Рассмотрим основы построения детерминированных математических моделей процессов на некоторых примерах.

*Модуль смесителя.* Модуль смесителя является одним из наиболее простых модулей. В соответствии с исходной задачей, два потока вещества, имеющие расходы  $G_1$  и  $G_2$  (моль/с), температуры  $T_1$  и  $T_2$  (К), составы  $X_{1i}$  и  $X_{2i}$  (мольные доли), теплоту  $Q_1$  и  $Q_2$  (Вт) подаются в смеситель, откуда выходит один поток с расходом  $G_3$ , температурой  $T_3$ , составом  $X_{3i}$  и теплотой  $Q_3$  (рис. 9.1).

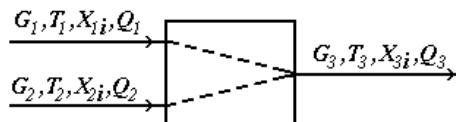


Рис. 9.1. Схема модуля смесителя

Физико-химическая модель смесителя предназначена для расчёта материального и теплового балансов процесса смешения двух потоков вещества. Существуют модули для смешения нескольких потоков вещества, но они являются расширенной модификацией смесителя для смешения двух потоков.

Обычно при составлении упрощённой детерминированной модели принимаются некоторые допущения. Для смесителя допущения будут следующие:

1. Структура потока в аппарате соответствует режиму идеального смешения.

В противном случае поток на выходе смесителя будет не полностью перемешанный и необходимо будет либо усложнять модель с учётом коэффициента перемешивания, либо с учётом гидродинамики потоков в аппарате. Это может быть не оправдано по удельным затратам времени на разработку модели, а при неполном учёте в модели всех протекающих физико-химических явлений приводить к значительным ошибкам.

2. Процесс смешения – адиабатический, не учитывается теплота смешения.

В противном случае необходимо учитывать процессы подвода и отвода теплоты, а также теплоту смешения, выделяющуюся при смешении веществ (в особых случаях в тепловом балансе смесителя требуется учитывать теплоту смешения).

3. Все потоки имеют одно фазовое состояние.

В противном случае модель нужно будет значительно усложнить, так как необходимо использовать смеситель, имеющий 2 или 3 выходных потока (газ, жидкость и твёрдое), так как одним потоком невозможно одновременно выразить различные фазовые состояния, будет необходимо учитывать фазовое равновесие в системе твёрдое-жидкость-газ и условия его установления, а также тепловой баланс процессов установления фазового равновесия.

4. Давление входных и выходных потоков – одинаковое.

При изменении давления могут возникнуть условия, приводящие к изменению фазового состояния.

При соблюдении всех указанных допущений рассмотрим уравнения, входящие в основу математического описания модели смесителя.

Общее уравнение материального баланса запишется

$$G_3 = G_1 + G_2. \quad (9.1)$$

С использованием уравнения материального баланса для вещества можно рассчитать состав выходного потока:

$$X_{3i} = \frac{X_{1i}G_1 + X_{2i}G_2}{G_3}, \text{ при } i = 1 \dots k. \quad (9.2)$$

При составлении материального баланса особое внимание требуется обратить на единицы измерения расходов и составов. Обычно рекомендуется использовать мольный расход (моль/с) и состав (% моль.) или массовый расход (кг/с) и состав (% мас.) или, при смешении газовых потоков, объёмный расход при нормальных термодинамических условиях (0 °С и 1 атм), т.е. нм<sup>3</sup>/с, и объёмный состав (% об.).

Следует отметить, что при расчётах состав потока обычно используется не в процентах, а в долях (сумма = 1), а использование различных единиц измерения для расхода и состава недопустимо.

Общее уравнение теплового баланса запишется

$$Q_3 = Q_1 + Q_2. \quad (9.3)$$

При неизвестной теплоте потока она может быть рассчитана на основании материального баланса по уравнению

$$Q = GC_p T,$$

где  $CP$  – удельная изобарная теплоёмкость потока (смеси веществ), которая рассчитывается по правилу аддитивности:

$$C_p = \sum_{i=1}^k C_{pi} X_i, \quad (9.4)$$

где  $C_{pi}$  – изобарная теплоёмкость  $i$ -го компонента потока, которая может быть рассчитана по уравнению

$$C_{pi} = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3, \quad (9.5)$$

коэффициенты  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $d$  которого для  $i$ -го вещества берутся из справочника.

Температура выходного потока рассчитывается методом итераций:

$$T_3 = \frac{Q_3}{G_3 C_{p3}}, \quad \text{где} \quad C_{p3} = f(T_3). \quad (9.6)$$

*Модуль делителя.* Модуль делителя является одним из наиболее простых модулей. В соответствии с исходной задачей, поток вещества, имеющий расход  $G_1$  (моль/с), температуру  $T_1$  (К), составы  $X_{1i}$  (мольные доли) и теплоту  $Q_1$  (Вт) подаётся в делитель, откуда выходят два потока с расходами  $G_2$  и  $G_3$ , температурами  $T_2$  и  $T_3$ , составами  $X_{2i}$  и  $X_{3i}$  и теплотой  $Q_2$  и  $Q_3$  (рис. 9.2).

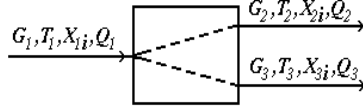


Рис. 9.2. Схема модуля делителя

Физико-химическая модель делителя предназначена для расчёта материального и теплового балансов процесса деления одного потока вещества на два потока. Существуют модули для деления потока на большее количество потоков, но они являются расширенной модификацией делителя на два потока.

Для делителя, допущения будут следующие:

1. Состав, температура и давление выходных потоков равны составу, температуре и давлению входного потока.
2. Все потоки имеют одно фазовое состояние.

Известно два способа деления потока. Для первого способа требуется знать расход первого выходящего потока, а для второго – коэффициент деления потока. В зависимости от типа связанного с делителем оборудования, применяться могут оба способа, однако, первый способ имеет ограничения, которые заключаются в том, что используются абсолютные значения, а не относительные. Например, в процессе расчётов, расход входящего потока будет меньше заданного расхода первого выходящего потока, т.е. второй выходящий поток будет иметь отрицательный расход, что невозможно. Второй способ более стабильный в расчётах, так как используются относительные значения, однако, в зависимости от типа связанного с делителем оборудования, использование фиксированного коэффициента деления может не соответствовать реальной ХТС.

Для реализации первого способа необходимо знать: расход  $G_1$  (моль/с), температуру  $T_1$  (К), состав  $X_{1i}$  (мольные доли) и теплоту  $Q_1$  (Вт), также расход первого выходящего потока  $G_2$ .

Основное уравнение материального баланса запишется

$$G_3 = G_1 - G_2. \quad (9.7)$$

Исходя из допущения, состав выходных потоков будет равен составу входного потока:

$$X_{3i} = X_{2i} = X_{1i}, \quad \text{при} \quad i = 1 \dots k. \quad (9.8)$$

Теплоты выходящих потоков могут быть рассчитаны пропорционально расходам выходящих потоков (температура и состав выходящих потоков равны входящему) или рассчитаны на основании материального баланса по уравнению

$$Q = G C_p T, \quad (9.9)$$

где  $C_p$  – удельная изобарная теплоёмкость потока (смеси веществ), которая рассчитывается по правилу аддитивности:

$$C_p = \sum_{i=1}^k C_{pi} X_i, \quad (9.10)$$

где  $C_{pi}$  – изобарная теплоёмкость  $i$ -го компонента потока, которая может быть рассчитана по уравнению

$$C_{pi} = a_i + b_i T + c_i T^2 + d_i T^3, \quad (9.11)$$

коэффициенты  $a$ ,  $b$ ,  $c$  и  $d$  которого для  $i$ -го вещества берутся из справочника.

Для реализации второго способа расчёта должны быть известны: расход  $G_1$  (моль/с), температура  $T_1$  (К), состав  $X_{1i}$  (мольные доли) и теплота  $Q_1$  (Вт), также задан коэффициент деления входящего потока  $K_f$  (в соответствии с обозначениями на рис. 9.2,  $K_f = G_2/G_1$ ).

В данном случае расходы выходящих из делителя потоков могут быть рассчитаны по формулам:

$$G_2 = G_1 K_f, \quad (9.12)$$

$$G_3 = G_1 (1 - K_f). \quad (9.13)$$

Далее, алгоритм расчёта не отличается от алгоритма первого способа расчёта.

*Модуль теплообменника.* В отличие от модулей смесителя и делителя, модуль теплообменника не является столь простым, так как при изменении температуры потоков возможно изменение их фазового состояния, а, следовательно, при расчёте необходимо учитывать такие изменения. В связи с этим, например, только для систем газ-газ, жидкость-жидкость и газ-

жидкость различают следующие модели теплообменников:

1. Теплообменник газ-газ или жидкость-жидкость без фазовых переходов (нагреватели и холодильники).
2. Теплообменник газ-газ или жидкость-жидкость с фазовым переходом (для системы газ-газ он называется конденсатор, а для системы жидкость-жидкость – испаритель, также существует более сложный вариант, когда тепло от конденсирующегося газа используется для испарения жидкости).

Кроме того, так как на процесс расчёта теплообменника оказывает влияние его конструкция, то для каждого указанного выше типа теплообменников различают следующие модели:

1. Противоточный («холодный» и «горячий» агенты идут навстречу друг другу, т.е. противотоком).
2. Прямоточный («холодный» и «горячий» агенты идут параллельно, т.е. прямотоком).
3. Перекрёстноточный (промежуточный вариант между указанными выше).
4. Одноходовой или многоходовой теплообменники (в многоходовых теплообменниках часть труб работает в режиме противотока, а часть – в режиме прямотока, или в многоходовом перекрёстноточном теплообменнике жидкость или газ по трубам может двигаться по ходу или против хода потока в межтрубном пространстве).
5. Варианты, когда один из агентов (или оба агента) движется за счёт естественной конвекции, которые, по интенсивности перемешивания потока за счёт естественной конвекции, в свою очередь делятся на горизонтальные и вертикальные.
6. Теплообменники смешения («холодный» и «горячий» агенты непосредственно контактируют друг с другом, например в аппарате с насадкой).

И, наконец, теплообменники, различающиеся по режиму работы на периодические и непрерывные.

Следует отметить, что согласно исходной задаче для модуля ХТС требуется рассчитать параметры выходных потоков при известных параметрах входных потоков и параметров элемента ХТС (в случае теплообменника, при известной площади теплообмена и коэффициента теплопередачи), что соответствует проверочному расчёту теплообменника. Однако иногда возникает необходимость рассчитать размеры теплообменника, входящего в ХТС. В таком случае необходимо использовать проектный расчёт теплообменника.

В качестве примера рассмотрим проверочный расчёт теплообменника-подогревателя для системы газ-газ, жидкость-жидкость или газ-жидкость с учётом следующих допущений:

1. Одноходовой кожухотрубный теплообменник в стационарном режиме.
2. Теплопередача не сопровождается изменением агрегатного состояния.
3. Коэффициенты теплоотдачи для «холодного» и «горячего» потоков рассчитывается при начальных температурах теплоносителей.
4. Схема движения потоков – противоточная.
5. Потери теплоты отсутствуют.

Схема теплообменника представлена на рис. 9.3.

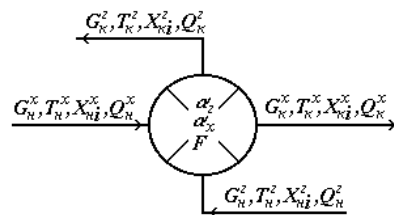


Рис. 9.3. Схема теплообменника

В соответствии с исходной задачей, для входного «горячего» потока известны расход  $G_{\text{г}}^{\text{г}}$ , температура  $T_{\text{г}}^{\text{г}}$ , состав  $X_{\text{г}}^{\text{г}}$  и теплота  $Q_{\text{г}}^{\text{г}}$ , для входного «холодного» потока – расход  $G_{\text{х}}^{\text{х}}$ , температура  $T_{\text{х}}^{\text{х}}$ , состав  $X_{\text{х}}^{\text{х}}$  и теплота  $Q_{\text{х}}^{\text{х}}$ . Кроме параметров потока, для теплообменника известны коэффициенты теплоотдачи для «холодного» и «горячего» потоков  $\alpha_{\text{х}}$  и  $\alpha_{\text{г}}$ , и площадь теплопередачи  $F$ .

В связи с тем, что фазового перехода не происходит, материальный баланс теплообменника запишется равенствами расходов и составов выходных потоков входным:

$$G_{\text{к}}^{\text{х}} = G_{\text{н}}^{\text{х}}, \quad G_{\text{к}}^{\text{г}} = G_{\text{н}}^{\text{г}}, \quad (9.14)$$

$$X_{\text{к}}^{\text{х}} = X_{\text{н}}^{\text{х}}, \quad X_{\text{к}}^{\text{г}} = X_{\text{н}}^{\text{г}}.$$

В соответствии с тепловым балансом

$$Q_{\text{тп}} = Q_{\text{н}}^{\text{г}} - Q_{\text{к}}^{\text{г}} = Q_{\text{к}}^{\text{х}} - Q_{\text{н}}^{\text{х}} \quad (9.15)$$

или

$$Q_{\text{тп}} = K_{\text{тп}} F \Delta T_{\text{ср}}, \quad (9.16)$$

где, коэффициент теплопередачи

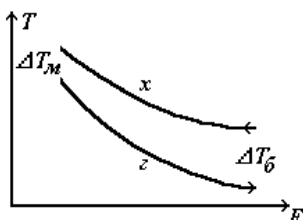


Рис. 9.4

$$K_{\text{тп}} = \frac{1}{1/\alpha_{\text{х}} + 1/\alpha_{\text{г}} + \delta_{\text{ст}}/\lambda_{\text{ст}}}, \quad (9.17)$$

где,  $\delta_{\text{ст}}$  и  $\lambda_{\text{ст}}$  – толщина и теплопроводность стенки.  
Движущая сила теплопередачи



$$\Delta t_{cp} = \frac{\Delta t_b - \Delta t_m}{\ln \frac{\Delta t_b}{\Delta t_m}}, \quad (9.18)$$

где  $\Delta t_b$  и  $\Delta t_m$  – большая и меньшая разности температур на входах и выходах теплообменника с учётом взаимного хода потоков, например, для противотока (рис. 9.4), т.е.

$$\Delta t_b = \text{большее из } (T_H^r - T_K^r), (T_K^x - T_H^x) \quad (9.19)$$

$$\Delta t_m = \text{меньшее из } (T_H^r - T_K^r), (T_K^x - T_H^x). \quad (9.20)$$

Так как температуры «горячего» и «холодного» потоков на выходе теплообменника неизвестны, то провести простой расчёт не представляется возможным, поэтому, можно рекомендовать проведение расчёта методом перебора или минимизации в соответствии со следующим алгоритмом:

1. Задаётся некоторое первоначальное значение температуры «холодного» потока на выходе из теплообменника. Обычно  $T_K^x = T_H^x + 0,1$ .

2. При известной температуре «холодного» потока на выходе, его составе и расходе, по формуле (9.9) с учетом формул (9.10 и 9.11) рассчитывается его теплосодержание  $Q_K^x$ .

3. С использованием формулы теплового баланса (9.15) рассчитывается тепловая нагрузка на теплообменник  $Q_{тп}$  и теплосодержание выходного «горячего» потока  $Q_K^r$ .

4. По величине теплосодержания выходного «горячего» потока  $Q_K^r$  определяется его температура (9.5) и движущая сила теплопередачи (9.18).

5. Определяется разность теплоты теплопередачи, рассчитанной в п. 3 и по формуле основного уравнения теплопередачи (9.16);

6. Если разность, определённая в п. 5, меньше заданной точности расчёта, то расчёт заканчивается. В противном случае температура выходящего «холодного» потока увеличивается на некоторое значение, и расчёт повторяется с п. 2.

При использовании математических методов минимизации, в п. 4 необходимо добавить логические условия по анализу пересечения линий нагрева/охлаждения, т.е. чтобы температура «холодного» потока на входе и выходе теплообменника не была выше температуры «горячего» потока.

В заключение следует отметить, что кроме указанного алгоритма поверочного расчёта теплообменника, существуют другие алгоритмы, приводящие к аналогичным результатам.

Из всего разнообразия теплообменного оборудования, исходя из начальных условий, выше был рассмотрен простейший вариант одноходового противоточного кожухотрубного теплообменника-подогревателя без учёта фазовых переходов и потерь. При возникновении фазовых переходов расчёт значительно усложняется, так как в данном случае требуется не только учитывать в тепловом балансе теплоту фазовых переходов, их полноту и «излом» линий нагрева/охлаждения, но и пересчитывать материальный баланс с учётом фазового равновесия и изменения состава и массы потоков вследствие фазовых переходов. Несомненно, данная задача является достаточно сложной и не универсальной, так как требует создания алгоритмов расчёта для каждого конкретного случая.

Кроме рассмотренного выше интегрального подхода к расчёту теплообменника, существует и дифференциальный подход, заключающийся в интегрировании дифференциальных уравнений материального и теплового баланса теплообменника по площади теплообмена с учётом всех нюансов. Основным преимуществом дифференциального подхода является отсутствие сложных методов учёта всех особенностей теплопередачи для всего теплообменника и его универсальность, так как различные особенности теплообмена всегда учитываются в дифференциальных уравнениях для элементарной площади теплопередачи  $dF$ . Именно поэтому, данный подход используется большинством программных продуктов для расчёта ХТС.

В связи с относительно высокой сложностью алгоритмов расчёта теплообменников с учётом фазовых переходов, модулей реакторов, модулей фазового равновесия, межфазного массообмена и т.д., в настоящем конспекте лекций они не приводятся. Полное описание алгоритмов расчёта этих модулей, а также дополнительные алгоритмы расчёта смесителя, делителя и теплообменника, можно найти в литературе по моделированию химико-технологических процессов.

## 10. Использование пакета ChemCAD для моделирования Химико-Технологических Систем

Пакет ChemCAD разработан компанией SIMSCI ChemStations, Inc. Он состоит из непосредственно базовой универсальной программы ChemCAD, предназначенной для статического моделирования основных процессов, основанных на фазовых и химических превращениях (имеющая средства расчёта геометрических размеров и конструктивных характеристик основных аппаратов, и оценки стоимости оборудования), так и дополнительных модулей: CC-DYNAMICS – расчёт динамических режимов, CC-THERM – расчёт теплообменников (типа труба в трубе, пластинчатых, кожухотрубных, аппаратов воздушного охлаждения), CC-BATCH – моделирование процессов периодической ректификации и ряда других.

Универсальная моделирующая программа имеет графический интерфейс для платформ PC/Windows, базу данных индивидуальных компонентов (более 1900 веществ), позволяет задавать различные многокомпонентные потоки в виде псевдокомпонентов или генерировать их на основании данных разгонки, поддерживает большинство методов расчёта термодинамических свойств (в том числе содержит специальные методы для расчёта амин, полимер содержащих смесей и т.д.).

Рассмотрим основные приёмы работы в пакете ChemCAD (в дальнейшем ХЕМКАД).

Все технические описания и данные содержатся в системе оперативной справочной информации ХЕМКАД (Chemcad On-line Help System). Система оперативной справочной информации включает в себя большую часть имеющейся документации ХЕМКАД.

*Окно моделирования технологического процесса (SIMULATION).* Работая в окне моделирования технологического процесса, пользователь создаёт технологическую схему процесса, задаёт её параметры, выполняет расчёт и осуществляет просмотр результатов. Таким образом, большую часть времени он работает именно в данном окне. Вид экрана при входе в окно моделирования (Simulation Window) (в результате загрузки уже существующего задания либо при создании нового задания) показан на рис. 10.1.

Структура данного экранного окна аналогична организации окна верхнего уровня.

Верхняя строка экрана (так называемая строка заголовка) содержит логотип программы ХЕМКАД, номер версии и имя текущего задания, а также кнопки Minimize (Свернуть), Maximize/Tile (Восстановить) и Close (Закрыть), которые всегда присутствуют в правой части строки заголовка.

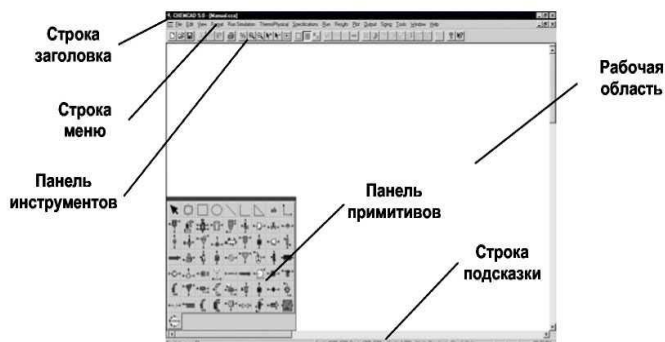


Рис. 10.1

За строкой заголовка, как обычно, следует строка меню, однако здесь, помимо команды Help (Справка), она содержит шестнадцать дополнительных команд:

File (Файл)	Управление файлами и управление печатью
Edit (Редактирование)	Задание различных параметров построения технологической схемы и её представления на экране. В распоряжении пользователя имеются следующие функции редактирования: Redraw (Перерисовка), Undo (Отменить ввод), Redo (Повторить ввод), Cut (Вырезать), Copy (Копировать), Paste (Вставить), Delete (Удалить), Flip (Зеркальное отображение), Rotate (Поворот) и др.
View (Вид)	Отображение/сокрытие панели инструментов, строки состояния и панели примитивов. Помимо этого, данная команда позволяет пользователю задать настройки сетки и панели примитивов
Format (Формат)	Выбор единиц измерения и задание формата отображения графических данных
ThermoPhysical (Физические свойства и термодинамические характеристики)	Выбор компонентов; выбор методов расчёта констант равновесия, энтальпии и транспортных свойств; редактирование базы данных; задание твёрдых веществ и редактирование матриц ПБВ
Specifications (Задание параметров)	Ввод и редактирование данных, задающих входные параметры потоков и единиц оборудования, и

	управление этими данными (для выполнения этих функций можно также дважды щёлкнуть мышью по изображению потока или единицы оборудования непосредственно на схеме)
Run (Счёт)	Выполнение задачи моделирования и параметрических расчётов; задание последовательности выполнения расчёта
Results (Результаты)	Просмотр результатов расчёта
Plot (График)	Графическое представление результатов расчёта
Output (Вывод)	Подготовка отчётов и диаграмм технологического процесса
Sizing (Размеры)	Выполнение проектного и поверочного расчёта различных типов оборудования
Tools (Инструменты)	Выполнение различных служебных функций, связанных с моделированием (таких как регрессия данных, предсказание образования твёрдого CO <sub>2</sub> и гидратов, расчёт содержания органики и потребности в химически связанном кислороде (TOD/COD) и др.
Window (Окно)	Управление отображением окон и пиктограмм
Help (Справка)	Вызов справочной системы ХЕМКАД

Ниже строки меню расположена панель инструментов. Ниже главной панели инструментов располагается рабочая область экрана. Обратите внимание на то, что она снабжена линейками прокрутки, позволяющими продвигать рабочую область на экране в направлении вверх-вниз и вправо-влево. В данный момент, поскольку мы ещё не приступили к построению технологической схемы, эта область должна быть пустой.

Внутри рабочей области располагается главная панель примитивов (Main Palette). Она включает в себя основные элементы, необходимые для построения технологической схемы. Работа с данной панелью будет описана ниже в соответствующем разделе настоящего руководства.

Нижняя строка экрана (строка подсказки) была описана ранее.

*Окно построения графиков (PLOT).* ХЕМКАД даёт пользователю возможность строить различные виды графиков. После того как график построен, он отображается в окне Plot (График). Назначение данного окна состоит в том, чтобы предоставить пользователю возможность улучшить внешний вид графика и/или отредактировать его перед распечаткой (или сохранением в файле). Ниже показан типичный вид окна построения графиков. Понятно, что тип графика и представленные на нём данные могут быть различными, однако общий вид окна остаётся неизменным.

На график автоматически наносятся генерируемые программой заголовок (Title) и экспликация (Legend). Заголовок располагается в верхней части графика, а экспликация – в его нижней части. Их можно редактировать при помощи функции редактирования графиков Chart Explorer. Доступ к функции Chart Explorer обеспечивает опция Edit (Редактирование) меню Graph (Графика).

Заголовок графика и обозначения для осей  $x$  и  $y$  также являются объектами и могут редактироваться.

- Вы можете требуемым образом откорректировать график и получить необходимые распечатки (твёрдые копии).

*Основные правила моделирования ХТС.* Моделирование химико-технологического процесса в ХЕМКАД включает в себя следующие десять основных этапов:

1. Создание нового задания.
2. Выбор единиц измерения.
3. Построение технологической схемы.
4. Выбор компонентов.
5. Выбор термодинамических моделей.
6. Задание потоков питания.
7. Ввод параметров оборудования.
8. Запуск программы моделирования.
9. Просмотр результатов.
10. Распечатка данных.

Эти этапы не обязательно выполнять в указанной последовательности; не обязательно также выполнять при построении технологической схемы все эти этапы. В то же время необходимо рассмотреть целесообразность выполнения каждого из них при решении любой конкретной задачи.

Работая с программой, Вы можете в любой момент получить помощь. В нижней строке экрана отображается краткое описание объекта, выделенного в данный момент на экране. Команда Help (Справка) обеспечивает доступ к оперативному справочному руководству (Online Manual), которое содержит наиболее подробную техническую информацию. Для получения контекстно-зависимой справки служит функциональная клавиша F1 (достаточно поместить курсор в нужное поле экрана и нажать клавишу F1). Все эти справочные функции призваны упростить Ваше общение с программой.

ХЕМКАД – объектно-ориентированная программа. Это означает, что большая часть функций ввода и редактирования может выполняться двойным щелчком мыши (или щелчком правой кнопкой мыши) по соответствующему объекту, а также путём использования команд меню.

Задание всех параметров для потоков и единиц оборудования (ввод данных) осуществляется с использованием окон диалога. Эти окна являются контекстно-зависимыми. Для ввода данных в них используются поля ввода текста, поля со списком, флажки и переключатели.

## ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Условие задачи, предлагаемой в качестве примера в данном Руководстве, представлено на рис. 10.2. Производится расчёт стабилизатора конденсата. Входным потоком на установку является газовый поток. Условия для потока питания приведены на схеме. Наша задача заключается в том, чтобы рассчитать для данной (существующей) установки новые рабочие условия и внести все необходимые изменения в её конструкцию. Проектные требования следующие.

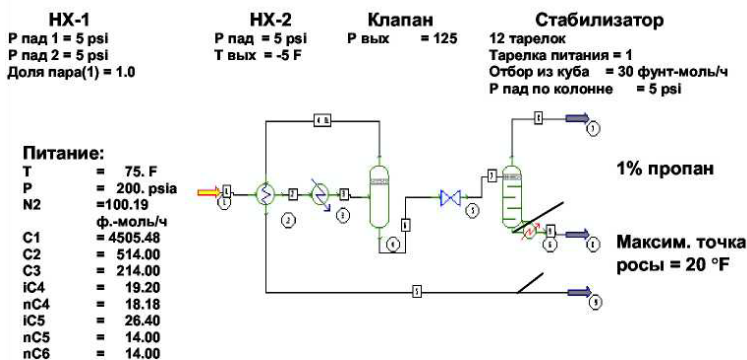


Рис. 10.2. Задача расчёта стабилизатора конденсата

Наивысшая температура в точке росы (т.е. наивысшее возможное значение точки росы) для газообразного продукта на выходе должна составлять не более 20 °F.

Содержание пропана в стабилизированном конденсате (поток 9) не должно превышать 1 %.

При первом запуске ХЕМКАД на экране появляется главное окно ХЕМКАД. Разверните это окно (т.е. увеличьте его так, чтобы оно занимало весь экран). Для этого следует воспользоваться расположенной в правом верхнем углу окна ХЕМКАД кнопкой Maximize (Развернуть). Окно ХЕМКАД заполнит весь экран (рис. 10.3).

Верхняя строка называется строкой заголовка. В левой её части отображается логотип программы ХЕМКАД и имя программы, а справа находятся обычные для операционной системы WINDOWS кнопки Minimize (Свернуть), Maximize/Tile (Развернуть/ Восстановить) и Close (Закреть).

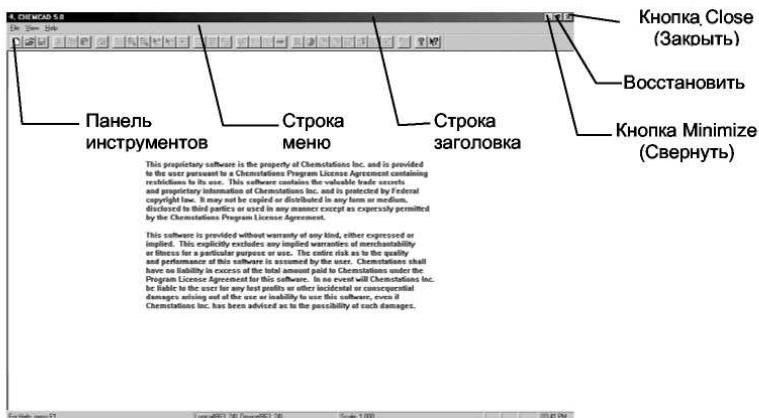


Рис. 10.3

Следующую строку обычно называют строкой меню. Она содержит команды меню верхнего уровня ХЕМКАД.

1. File (Файл) – задание формата вывода данных, открытие файлов заданий, управление печатью, а также получение информации общего характера о программе ХЕМКАД.

2. View (Вид) – включение и отключение отображения на экране панели инструментов и строки состояния.

3. Help (Справка) – вызов оперативной справочно-информационной системы.

Третья строка (панель) – это панель инструментов. Она содержит символы, служащие для непосредственного вызова различных функций работы с файлами, «стандартное» обращение к которым осуществляется через меню различного уровня.

Остальная область экрана для данного уровня неактивна.

В данном окне отображается только верхний уровень команд ХЕМКАД включает в себя и окна другого уровня, при помощи которых задаются параметры и выполняется расчёт задачи моделирования, создаются диаграммы технологических процессов, создаются и редактируются графики и т.д.

Мы начнем работу с того, что откроем новое задание и присвоим ему имя. Для этого служит команда File (Файл). Чтобы открыть меню File (Файл), щёлкните мышью по слову File в строке меню.

Выберите в данном меню опцию New Job (Новое задание), щёлкнув мышью по соответствующей строке. На экране открывается диалоговое окно (рис. 10.4).

Это диалоговое окно содержит запрос ввода имени нового задания и папки, в которой оно будет находиться. Мы назовем наше задание TUTOR1. Введите это имя в поле File Name (Имя файла), а затем закройте окно диалога, щёлкнув по кнопке Save (Сохранить). В результате Вы попадаете в главное рабочее окно ХЕМКАД.

Верхняя строка экрана (так называемая строка заголовка) содержит логотип программы ХЕМКАД и имя текущего задания, а также кнопки Minimize (Свернуть), Maximize (Развернуть), Tile (Восстановить) и Close (Закреть), которые всегда присутствуют в правой части строки заголовка.

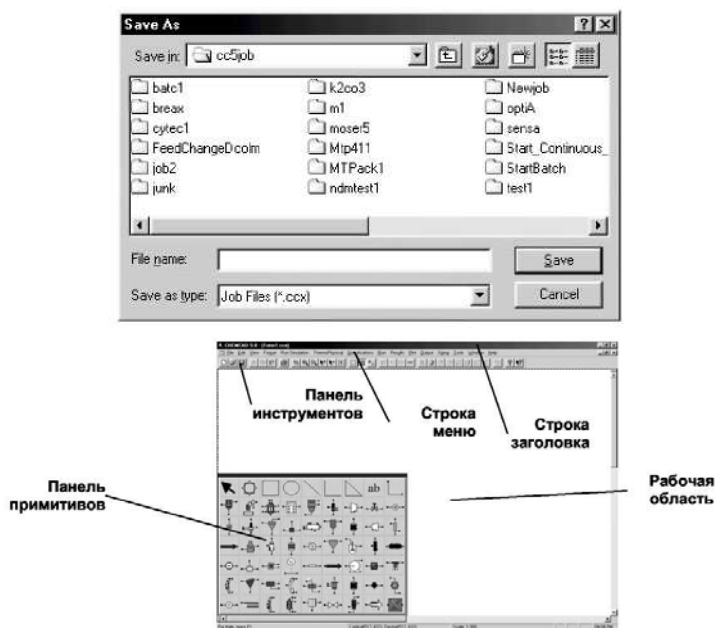


Рис. 10.4

За строкой заголовка следует строка меню. Вместе с командой Help (Справка) она содержит шестнадцать команд (описанных ранее).

*Выбор единиц измерения.* Чтобы задать для данного процесса единицы измерения, воспользуйтесь командой Format (Формат). Для её вызова нажмите клавиши ALT + M или щёлкните мышью по имени команды. На экран выводится меню (рис. 10.5).



Рис. 10.5

Теперь выберите в меню опцию Eng Units (Единицы измерения), щёлкнув мышью по соответствующей строке. На экране появляется окно диалога, показанное на рис. 10.6.

Британская система единиц (ENGLISH) устанавливается по умолчанию, поэтому в данный момент она выделена подсветкой. Для перехода к требуемой системе единиц измерения щёлкните мышью по одной из соответствующих кнопок: English (Британская), Alt SI (модифицированная СИ), SI (СИ) или Metric (метрическая). Для изменения используемых единиц измерения отдельных параметров щёлкните мышью по наименованию соответствующего параметра в диалоговом окне и выберите в открывающемся списке требуемую единицу измерения. Поскольку в данном примере мы будем использовать британскую систему единиц измерения, щёлкните по кнопке Cancel (Отмена) для выхода из данного окна диалога.

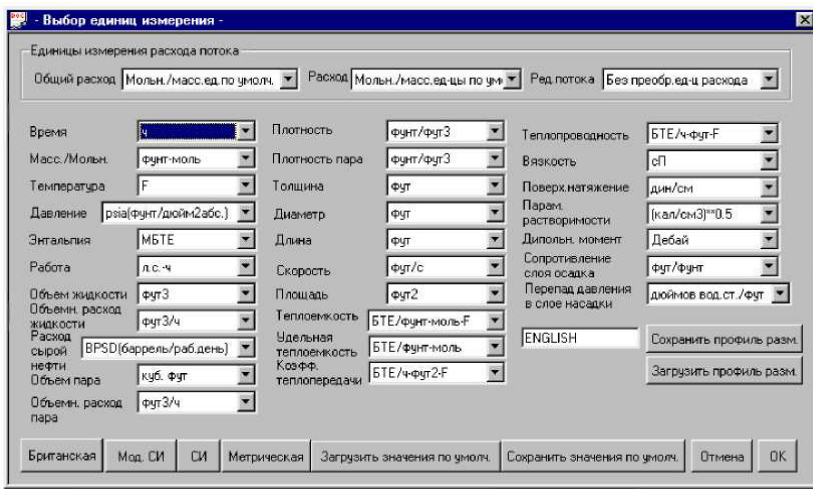


Рис. 10.6

**Построение технологической схемы.** В ходе построения технологической схемы вы будете работать с соответствующей панелью примитивов, которая показана на рис. 10.7.

Первое поле служит для возврата курсора к его обычному виду (при этом он снова приобретает вид стрелки).

Второе поле позволяет выполнять поворот объектов на технологической схеме.

Следующие пять полей (по горизонтали) служат для нанесения на технологическую схему соответствующих примитивов.

Восьмое поле (поле «ab») используется для нанесения на схему текста.

Следующее (девятое по счёту) поле предназначено для нанесения на схему линий между собой единицы оборудования).

Все остальные поля главной панели содержат символические обозначения соответствующих единиц оборудования, входящих в состав библиотеки ХЕМКАД.

При размещении курсора в одном из полей появляется небольшая пояснительная панель, содержащая наименование и описание аппарата, представленного в нём.

Для нанесения пиктограммы единицы оборудования на технологическую схему необходимо указать курсором на соответствующее поле и щёлкнуть левой кнопкой мыши.

Указав курсором на одно из полей панели, Вы открываете дополнительную панель, содержащую дополнительные пиктограммы. Для закрытия этой панели достаточно щёлкнуть в том же самом поле главной панели.

Одновременно на экране может отображаться несколько субпанелей.

Отображение главной панели на экране можно вызвать и отключить при помощи команды View/Main Palette (Вид/Главная панель примитивов), а также щелчком по имени команды Run Simulation (Запуск моделирования) или по клавише переключения режимов S/G (Моделирование/Графика).

Управление формой и размерами главной панели осуществляется при помощи команд меню View/Palette Settings (Вид/Установки панели примитивов).

На пиктограммах оборудования позиции входа потоков в аппарат обозначаются квадратиками синего цвета, а позиции выхода – квадратиками красного цвета.

Теперь нам нужно задать топологию технологической схемы. Построение технологической схемы по существу представляет собой процесс размещения пиктограмм оборудования на экране, соединения их между собой потоками, а затем дополнения схемы различными графическими объектами для улучшения наглядности изображения. Всё это можно сделать при помощи панели примитивов (рис. 10.8).

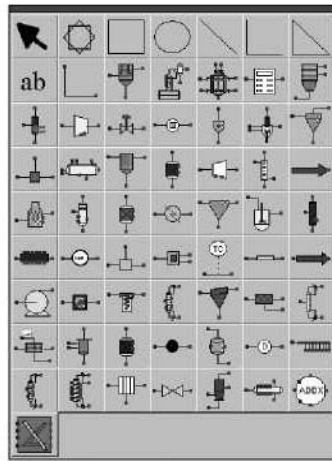


Рис. 10.7

поворот объектов на технологической схеме. Второе поле позволяет выполнять поворот объектов на технологической схеме.

Следующие пять полей (по горизонтали) служат для нанесения на технологическую схему соответствующих примитивов.

Восьмое поле (поле «ab») используется для нанесения на схему текста.

Следующее (девятое по счёту) поле предназначено для нанесения на схему линий между собой единицы оборудования).

Все остальные поля главной панели содержат символические обозначения соответствующих единиц оборудования, входящих в состав библиотеки ХЕМКАД.

При размещении курсора в одном из полей появляется небольшая пояснительная панель, содержащая наименование и описание аппарата, представленного в нём.

Для нанесения пиктограммы единицы оборудования на технологическую схему необходимо указать курсором на соответствующее поле и щёлкнуть левой кнопкой мыши.

Указав курсором на одно из полей панели, Вы открываете дополнительную панель, содержащую дополнительные пиктограммы. Для закрытия этой панели достаточно щёлкнуть в том же самом поле главной панели.

Одновременно на экране может отображаться несколько субпанелей.

Отображение главной панели на экране можно вызвать и отключить при помощи команды View/Main Palette (Вид/Главная панель примитивов), а также щелчком по имени команды Run Simulation (Запуск моделирования) или по клавише переключения режимов S/G (Моделирование/Графика).

Управление формой и размерами главной панели осуществляется при помощи команд меню View/Palette Settings (Вид/Установки панели примитивов).

На пиктограммах оборудования позиции входа потоков в аппарат обозначаются квадратиками синего цвета, а позиции выхода – квадратиками красного цвета.

Теперь нам нужно задать топологию технологической схемы. Построение технологической схемы по существу представляет собой процесс размещения пиктограмм оборудования на экране, соединения их между собой потоками, а затем дополнения схемы различными графическими объектами для улучшения наглядности изображения. Всё это можно сделать при помощи панели примитивов (рис. 10.8).



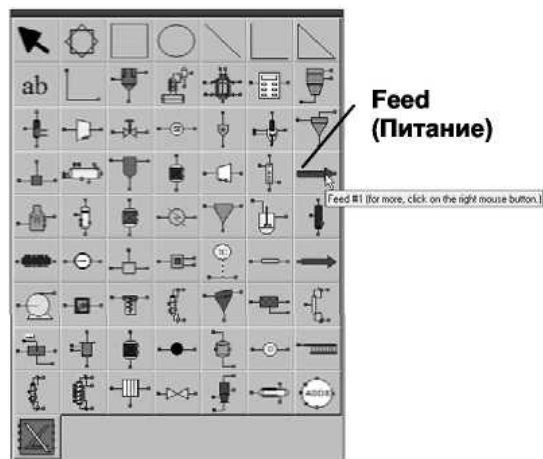


Рис. 10.8

Мы начнем нашу работу с размещения на схеме пиктограмм оборудования. В рамках ХЕМКАД существует соглашение, в соответствии с которым любой поток должен выходить из какого-либо аппарата и входить в какой-либо аппарат. Ввиду этого необходимо включить в схему пиктограмму Feed (Питание), которая будет служить в качестве аппарата источника потока питания. С этого мы и начнём построение технологической схемы. Укажите курсором на поле Feed главной панели.

Затем выполните следующие действия:

1. Щёлкните правой кнопкой мыши в поле пиктограммы источника питания. На экране отобразится субпанель, содержащая различные варианты символического обозначения источника питания. Повторно щёлкните правой кнопкой мыши в поле пиктограммы источника питания главной панели примитивов. При этом панель дополнительных пиктограмм исчезнет с экрана (именно так осуществляется вызов на экран дополнительных панелей пиктограмм единиц оборудования и отмена их отображения).

2. Щёлкните левой кнопкой мыши по пиктограмме источника питания (на главной панели примитивов). При этом панель закроется, а на экране появится маленький квадратик. Такой вид имеет курсор при задании положения пиктограмм единиц оборудования на технологической схеме.

3. Переместите курсор приблизительно в центр экрана, ближе к его левой границе, а затем щёлкните левой кнопкой мыши. На технологической схеме появится пиктограмма потока питания; при этом на экран снова выводится панель примитивов. Обращаем Ваше внимание на то, что, поскольку пиктограмма потока питания была выбрана на главной панели примитивов, её вид в точности соответствует виду пиктограммы, отображаемой на главной панели. Для выбора какой-либо другой пиктограммы для обозначения потока питания нам пришлось бы обратиться к субпанели, содержащей остальные пиктограммы потоков питания.

На этом размещение единицы оборудования Feed (Питание) завершается.

Теперь необходимо разместить на схеме два теплообменника. Для этого нужно выполнить следующие действия:

1. Укажите курсором на поле с изображением теплообменника и удерживайте на нём курсор до появления пояснительной надписи. Прочтите её, чтобы убедиться в том, что курсор действительно указывает на поле, открывающее доступ к пиктограммам теплообменников.

2. Щёлкните в этом поле правой кнопкой мыши. На экране появится субпанель пиктограмм теплообменников.

3. Укажите курсором на пиктограмму теплообменника с двумя входными потоками, как это показано на рис. 10.9.

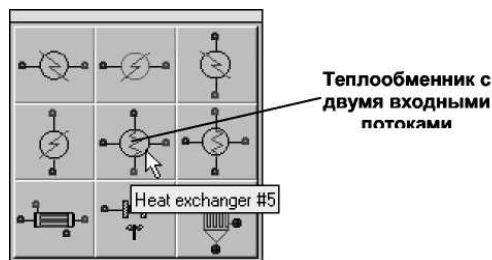


Рис. 10.9

4. Щёлкните левой кнопкой мыши по этой пиктограмме. Панели примитивов исчезнут с экрана, и на нём снова появится изображение курсора в виде квадратика.

5. Установите курсор приблизительно в 4 см справа от пиктограммы потока питания, а затем ещё раз щёлкните левой кнопкой мыши. На технологической схеме отобразится пиктограмма теплообменника; при этом на экран вновь выводится панели примитивов.

6. Теперь установите курсор на пиктограмму горизонтального теплообменника с одним входным потоком (рис. 10.10).

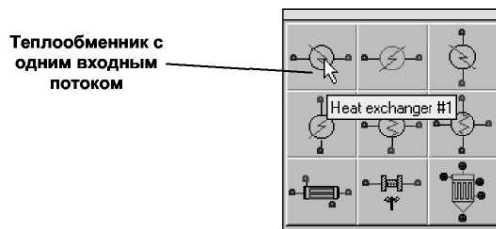


Рис. 10.10

7. Щёлкните левой кнопкой мыши по этой пиктограмме. Панели примитивов исчезнут с экрана, и на нём снова появится изображение курсора в виде квадратика.

8. Установите курсор приблизительно в 4 см справа от пиктограммы потока питания, а затем ещё раз щёлкните левой кнопкой мыши. На технологической схеме отобразится пиктограмма теплообменника; при этом на экран вновь выводятся панели примитивов.

9. Закройте субпанель примитивов, щёлкнув правой кнопкой мыши по полю пиктограмм теплообменников главной панели примитивов.

Ваша схема должна теперь выглядеть примерно так, как показано на рис. 10.11.

Затем, повторяя описанную выше процедуру, разместите на схеме испаритель и клапан.

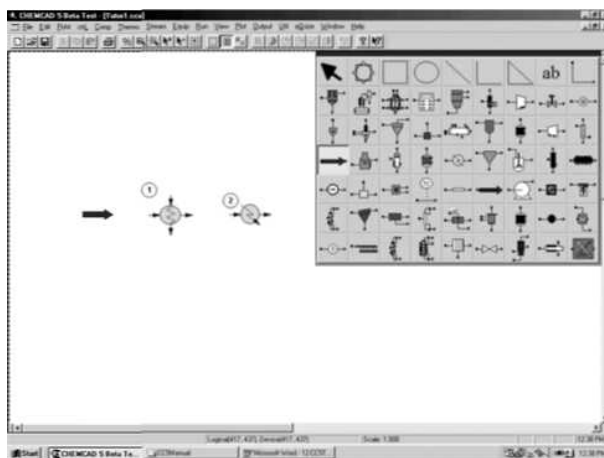


Рис. 10.11

В качестве самого стабилизатора конденсата мы будем использовать модуль ректификационной колонны. Внимательно рассмотрев панель примитивов, можно увидеть, что в ХЕМКАД существует несколько модулей расчёта ректификации. Пояснения для каждой из этих опций приведены в оперативном справочном руководстве, которое можно вызвать на экран в любой момент работы, щёлкнув по имени команды Help (Справка) в строке меню. В рамках данного примера мы решили использовать модель строгого расчёта ректификационной колонны, которой соответствует модуль Tower (Колонна). Расположение данной единицы оборудования на панели примитивов показано на рис. 10.12.

Поскольку мы хотим использовать на технологической схеме обозначение колонны с ребойлером и без конденсатора, нам придётся продолжить поиск соответствующей пиктограммы при помощи субпанели примитивов. Для её открытия щёлкните правой кнопкой мыши по полю с пиктограммой колонны. Щелчком левой кнопкой мыши выберите на открывающейся субпанели символ колонны, показанный на рис. 10.13.

Нанесите его на технологическую схему.

В завершение работы нам нужно нанести на технологическую схему три символа продуктов (Product) – по одному для каждого из трёх имеющихся потоков продуктов. Соответствующая пиктограмма находится на главной панели справа, ближе к её центру.

*Изображение потоков на технологической схеме.* Теперь необходимо соединить аппараты потоками. Для этого щёлкните один раз по полю пиктограммы Streams (Потоки) в составе основной панели примитивов (рис. 10.14).

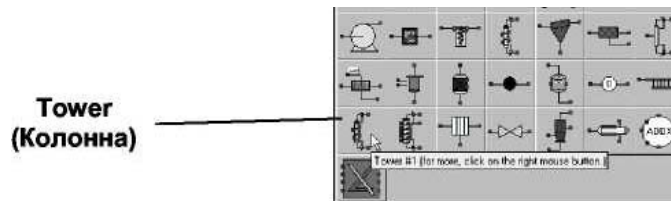


Рис. 10.12



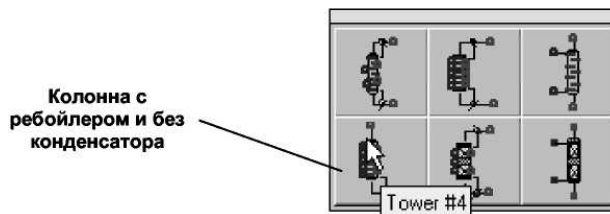


Рис. 10.13

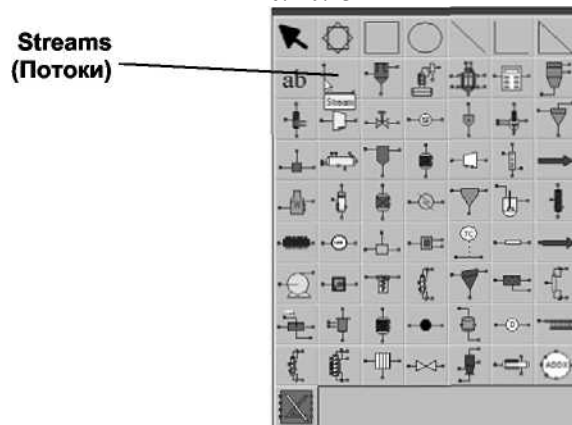


Рис. 10.14

При изображении потоков процесса на технологической схеме действует несколько общих правил, которые следует помнить:

1. Каждый поток направлен от аппарата-источника к аппарату-приемнику.
2. Каждая единица оборудования имеет позиции входа и выхода. Эти позиции задаются при создании символа аппарата. Программа всегда устанавливает потоки в эти позиции. При моделировании процесса поток всегда направлен из выхода аппарата-источника на вход аппарата-приемника, однако, при построении технологической схемы линию потока можно вычерчивать в любом направлении (т.е. как из позиции входа в позицию выхода, так и из позиции выхода в позицию входа в аппарат).
3. Когда мы начинаем задавать поток, курсор имеет форму крестика. При приближении к позиции выхода из аппарата он превращается в чёрную стрелку. Когда таким образом изменяется вид курсора, Вы можете щёлкнуть левой кнопкой мыши, чтобы задать начальную точку для потока (если курсор отмечает начальную позицию, которая Вам нужна).
4. После завершения присоединения потока к аппарату вид курсора остаётся прежним (чёрная стрелка). При приближении курсора к позиции входа или выхода появляется пояснительная надпись с указанием местоположения и номера данной позиции.
5. После того, как найдено требуемое положение (на это указывает появление пояснительной надписи), щёлкните левой кнопкой мыши для завершения вычерчивания линии потока.
6. В ходе вычерчивания линии потока панель примитивов исчезает с экрана. Её можно вновь вызвать на экран, щёлкнув левой кнопкой мыши в какой-либо точке экрана, не являющейся позицией входа (или выхода) единицы оборудования. Вам *не нужно* щёлкать мышью по пиктограмме потока (для соединения его с аппаратом) каждый раз, когда Вы начинаете построение линии потока.
7. В любой момент работы Вы можете перейти от размещения на схеме единиц оборудования к соединению их потоками и наоборот (при условии соблюдения сформулированных выше правил).
8. Когда Вы в первый раз изменяете направление потока, система позволяет сделать это беспрепятственно. При всех последующих изменениях направления потока необходимо сначала нажать левую кнопку мыши для задания длины или ширины, через которую Вы хотите провести поток. При этом на экране появляется точка привязки, задающая длину или широту.
9. Для выхода из режима построения потоков достаточно дважды щёлкнуть левой кнопкой мыши при вычерчивании линии потока.

Зная эти правила, мы можем теперь соединить аппараты схемы потоками.

Щёлкните по полю пиктограммы Streams (Потоки) главной панели. Панель примитивов исчезнет с экрана, а курсор примет форму перекрестия. Подведите курсор вплотную к кончику стрелки, обозначающей поток питания. После того как курсор примет вид чёрной стрелки, нажмите левую кнопку мыши. Не отпуская её, проведите при помощи мыши линию потока в направлении вправо. При появлении на экране пояснительной надписи, относящейся к крайней левой позиции входа в первый теплообменник, нажмите левую кнопку мыши. ХЕМКАД изобразит поток, идущий прямо в эту точку, и присвоит ему идентификационный (ID) номер на схеме. Идентификационные номера присваиваются последовательно, поэтому номер этого потока 1. При желании Вы можете изменить этот номер с помощью меню EDIT STREAM (Редактирование потока); для вызова этого меню достаточно щёлкнуть по изображению потока правой кнопкой мыши.

Теперь изобразим второй поток. Переместите курсор к крайней правой точке первого теплообменника. Когда курсор окажется достаточно близко к позиции выхода из аппарата, он снова примет вид чёрной стрелки. Нажмите левую кнопку мыши. Подведите поток к позиции входа во второй теплообменник и снова нажмите левую кнопку мыши при появлении пояснительной надписи. Изображение потока 2 закончено.

Затем изобразим поток, идущий из второго теплообменника в испаритель. Установите положение крайней правой точки выхода аппарата Heat Exchanger (Теплообменник). При появлении курсора в виде чёрной стрелки щёлкните левой кнопкой мыши. Теперь ведите поток к испарителю до тех пор, пока не появится пояснительная надпись, обозначающая его первый вход. Нажмите левую кнопку мыши, чтобы завершить изображение потока 3.

Далее мы построим поток 4, идущий из верхней части испарителя. Передвигайте курсор вблизи верхней части испарителя до тех пор, пока не появится пояснительная надпись, а затем нажмите левую кнопку мыши. Потом прорисуйте поток вверх примерно на дюйм, а затем налево до точки, находящейся непосредственно над первым теплообменником. Теперь попытайтесь спустить этот поток вертикально вниз. Вы увидите, что это Вам не удаётся: горизонтальная линия движется вниз вслед за курсором. Итак, прежде, чем сделать поворот, необходимо зафиксировать на определённой высоте горизонталь, от которой линия потока пойдёт вниз. Для этого выберите высоту горизонтальной линии Вашего поперечного потока и нажмите левую кнопку мыши. Теперь ведите поток вниз, к верху теплообменника. Когда появится пояснительная надпись, соответствующая позиции входа, ещё раз нажмите левую кнопку мыши.

Таким же образом начертите линии остальных потоков. После завершения работы технологическая схема должна выглядеть примерно так, как показано на рис. 10.15.

Если необходимо удалить или скорректировать линию потока, щёлкните по ней правой кнопкой мыши для вызова меню редактирования потоков (Edit Stream), а затем воспользуйтесь командами Delete (Удалить) и/или Redraw (Перерисовка).

После завершения построения всех потоков дважды щёлкните мышью в какой-либо свободной области экрана для возвращения на экран панели примитивов.

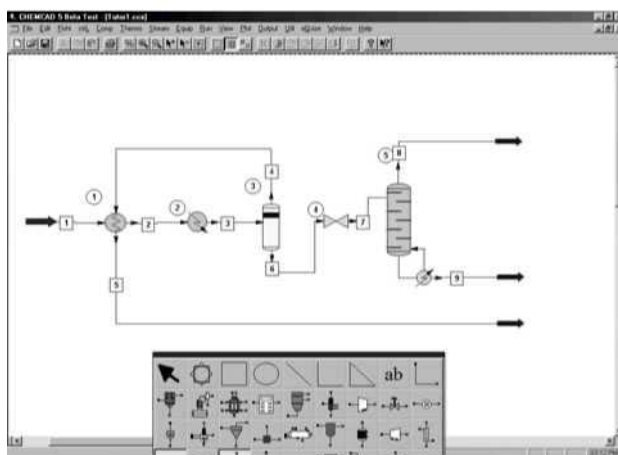


Рис. 10.15

На этом построение технологической схемы закончено. Для продолжения работы нам необходимо перейти в режим моделирования. Щёлкните мышью по имени команды Run Simulation (Запуск моделирования) в строке меню. Панель примитивов закрывается, и становятся доступными функции ввода данных.

*Выбор компонентов.* Теперь нужно задать компоненты для использования в данной задаче моделирования. Для этого служит команда ThermoPhysical (Физические свойства и термодинамические характеристики). Данная команда может быть вызвана путём ввода комбинации клавиш ALT + L либо щелчком мыши. При её выполнении на экране открывается меню (рис. 10.16).

Для выбора компонентов из стандартного банка данных ХЕМКАД щёлкните мышью по опции Component List (Список компонентов). На экран выводится диалоговое окно выбора компонентов (Component Selection), структура которого показана на рис. 10.17.

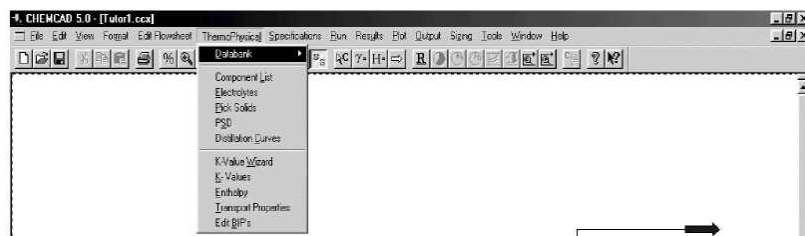


Рис. 10.16

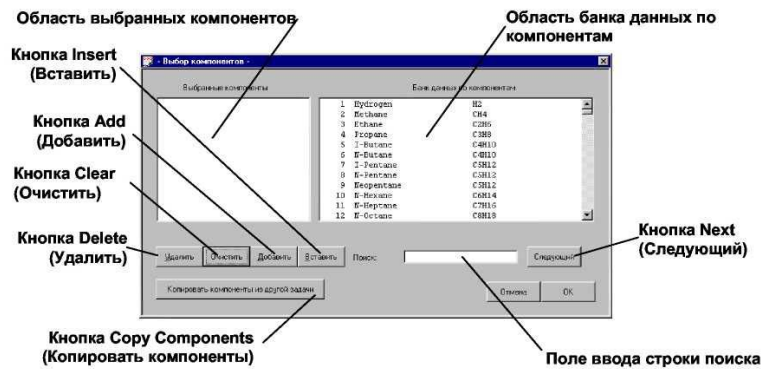


Рис. 10.17

Область выбранных компонентов (Selected Components): в этой области будет отображаться текущий список выбранных компонентов.

Область банка данных по компонентам (Component Databank): здесь приводится список всех компонентов, хранящихся в банке (банках) данных. Компоненты отсортированы в списке по их ID номерам. Когда данная область активна, один из компонентов в ней выделен синей подсветкой.

Кнопка Insert (Вставить): с помощью данной кнопки можно вставить компонент в любое место списка (а не только в его конец).

Кнопка Add (Добавить): добавление текущего компонента, выделенного подсветкой, в конец списка компонентов для технологической схемы. Выбор компонентов можно также производить двойным щелчком мышью по соответствующей строке. Выбранный компонент появится в списке, отображаемом в области выбранных компонентов.

Кнопка Clear (Очистить): служит для удаления всех компонентов из списка. Щёлкнув по данной кнопке, Вы стираете все компоненты, присутствующие в данный момент в области выбранных компонентов (Selected Components Area).

Кнопка Delete (Удалить): удаление отдельных компонентов из списка. Для удаления компонента необходимо выделить его в области выбранных компонентов (Selected Components Area) и щёлкнуть по кнопке Delete (Удалить).

Поле ввода строки поиска используется для поиска компонента в банке данных. После того как требуемый компонент будет обнаружен, его можно внести в список компонентов (для этого нужно дважды щёлкнуть мышью по соответствующей строке или выделить его подсветкой, а затем щёлкнуть по кнопке Add (Добавить)). Поиск компонентов программой осуществляется путём подбора строки символов, соответствующей введённой в данном поле. Такая строка выбора может представлять собой сочетание любых буквенных и цифровых символов. Программа находит любой тождественный ей фрагмент ID номера, формулы или имени (либо одного из синонимичных имен) компонента, входящего в состав банка данных.

По мере ввода строки поиска программа автоматически находит ближайший соответствующий ей фрагмент и выделяет его подсветкой. При изменении вида строки поиска меняется и выделенный компонент.

Кнопка Next (Следующий): если найден не тот компонент, который Вам нужен, щёлкните по кнопке Next (Следующий) для выполнения поиска следующей строки, идентичной введённой Вами.

Копирование компонентов из другой задачи: при помощи кнопки Copy Components (Копировать компоненты) Вы можете импортировать список компонентов из какой-либо другой задачи ХЕМКАД. При нажатии данной кнопки программа предлагает пользователю осуществить поиск местонахождения задачи ХЕМКАД, из которой будут импортированы компоненты. Найденные компоненты будут добавлены в список, находящийся в области выбранных компонентов (Selected Components Area).

С целью иллюстрации процедуры выбора компонента мы выполним её для азота (Nitrogen). Щёлкните мышью в поле ввода строки поиска, а затем введите в ней строку «Nitrogen». При вводе данной строки программа отыскивает компонент «азот» и выделяет его подсветкой. Для его внесения в список компонентов необходимо дважды щёлкнуть по нему мышью или нажать кнопку Add (Добавить). После этого строка компонента появится в области выбранных компонентов.

Для поиска компонента «азот» (Nitrogen) можно было также ввести в данное поле строку «N2» или «46» (это ID номер азота в банке данных). Можно использовать строки символов, представляющие собой часть названия, номера или формулы компонента. Кроме того, Вы могли щёлкнуть мышью непосредственно по строке требуемого компонента (для его выделения), а затем по кнопке Add (Добавить).

Выберите таким же образом остальные компоненты в списке (помните о том, что в случае, когда первый поиск не привёл к обнаружению требуемого компонента, необходимо щёлкнуть по кнопке Next (Следующий) для поиска следующей строки, соответствующей введённой Вами). Выполните поиск следующих компонентов и внесите их в список компонентов: Methane (метан); Ethane (этан); Propane (пропан); I-butane (изобутан); N-butane (н-бутан); I-pentane (изопентан); N-pentane (н-пентан); N-hexane (н-гексан).

Окно диалога должно приобрести вид, показанный на рис. 10.18.

Теперь нам осталось только сохранить наш список; для этого нажмите кнопку Save (Сохранить).

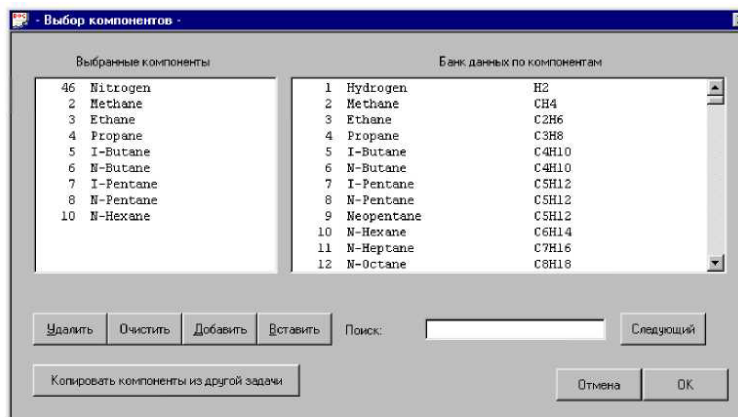


Рис. 10.18

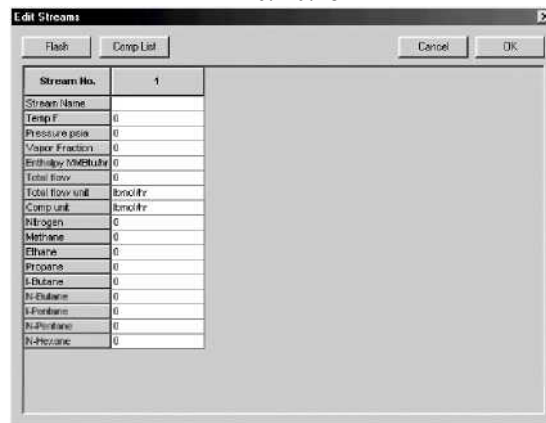


Рис. 10.19

*Задание характеристик потоков питания.* С помощью команды Specifications (Задание параметров) в строке меню либо дважды щёлкнув мышью непосредственно по линии потока, параметры которого мы хотим задать. Щёлкнуть мышью по линии потока (или по его ID номеру), безусловно, проще, поэтому мы так и сделаем. Выполните двойной щелчок мышью по линии потока *I*. На экране появляется диалоговое окно Edit Streams (Редактирование потоков) (рис. 10.19).

Первое поле – Stream Name (Имя потока) – даёт Вам возможность ввести для потока пояснительную надпись (обозначение). Это обозначение, которое может включать 16 буквенных и/или цифровых символов, появится на схеме после завершения работы с данным диалоговым окном.

**Примечание.** Существует ещё несколько способов ввода и/или редактирования таких пояснительных надписей для потоков.

В следующих четырёх полях ввода – Temperature (Температура), Pressure (Давление), Vapor Fraction (Доля пара) и Enthalpy (Энтальпия) – задаются термодинамические свойства потока. Согласно правилу фаз Гиббса, если известен состав потока, задание двух из четырёх термодинамических параметров определяет значения остальных двух параметров. Таким образом, если для потока заданы состав, температура и давление, то тем самым будут однозначно определены значения доли пара и энтальпии (что опять-таки действительно только для смеси). И, наоборот, задание состава, давления и энтальпии однозначно определяет значения температуры и доли пара.

Соглашения, принятые в рамках ХЕМКАД, однако, не предоставляют такой степени свободы. Поскольку значения энтальпии рассчитываются по отношению к базовой точке и процесс расчёта достаточно сложен, это может приводить к существенной погрешности. Ввиду этого ХЕМКАД не даёт пользователю возможности вводить для потока значения энтальпии (из этого правила существует единственное исключение: возможен ввод значения энтальпии для потока с общим расходом компонентов, равным нулю, как один из способов задания тепловой нагрузки для единицы оборудования). Таким образом, в ХЕМКАД для того, чтобы однозначно определить поток, пользователь должен задать его состав и любые два из следующих трёх параметров: температуры, давления и доли пара. Всё вышесказанное касается смесей; для чистых компонентов иногда бывает необходимо ввести значения всех трёх этих параметров.

- Поля Total Flow Units (Единицы измерения общего расхода) и Comp Units (Единицы измерения расхода компонентов) предоставляют пользователю различные способы задания состава потоков. После того как в поле Comp Units (Единицы измерения расхода компонентов) в качестве единиц измерения заданы мольные, массовые или объёмные доли (это можно сделать как для всей системы, так и для использования в рамках конкретного задания), становится доступным комбинированный список Total Flow Units (Единицы измерения общего расхода). Если для компонентов заданы количественные, т.е. абсолютные, единицы расхода, то общий расход потока равен сумме расходов компонентов; в этом случае комбинированный список Total Flow Units (Единицы измерения общего расхода) становится недоступным для редактирования.

- Если для компонентов (в поле Comp Units) заданы количественные единицы измерения расхода (в противоположность мольным, массовым или объёмным долям), то по мере ввода значений расхода компонентов они автоматически суммируются, причём текущее значение суммарного расхода отображается в поле Total Flow (Общий расход потока).

- В левом верхнем углу окна диалога находится кнопка Flash (Испарение). При нажатии данной кнопки в любой момент работы программа выполняет расчёт испарения с использованием текущих введённых значений состава и термодинамических параметров потока. Тем самым пользователь получает возможность производить быстрый расчёт испарения, не прерывая работы с данным окном диалога.

- Если суммарное значение расхода в мольных долях оказывается больше или меньше 1,0, то при выполнении расчёта испарения или при завершении работы с данным диалоговым окном значения расхода компонентов будут автоматически нормализованы (пропорционально пересчитаны).

Теперь можно начинать ввод данных. Начнём с ввода значения температуры. Перейдите в поле ввода значений температуры (для этого нужно щёлкнуть по нему мышью).

После того как подсветка установлена в нужном поле, введите 75 и нажмите клавишу (стрелка вниз). При нажатии клавиши (стрелка вниз) подсветка перемещается в поле ввода значений давления. Введите в это поле значение 200.

Далее, спускаясь по списку вниз, мы перейдём в поле Nitrogen (Азот). Переместите курсор вниз так, чтобы он указывал на поле ввода справа от надписи Nitrogen, и нажмите левую кнопку мыши. Введите в данное поле значение 100,19 и т.д.

Например:

Methane	метан	4505,48
Ethane	этан	514
Propane	пропан	214
I-butane	изобутан	19,2
N-butane	н-бутан	18,18
I-pentane	изопентан	26,4
N-pentane	н-пентан	14
N-hexane	н-гексан	14

Сохраните эти данные по параметрам потоков, щёлкнув по кнопке ОК в правом верхнем углу окна диалога. Теперь мы можем начать ввод параметров оборудования.

*Ввод параметров оборудования.*

*Задание параметров первого теплообменника.* Так же как и для потоков, ввод параметров оборудования может производиться либо с использованием команды Specifications (Задание параметров) в строке меню, либо после двойного щелчка мышью непосредственно по пиктограмме единицы оборудования, параметры которой мы задаём. Поскольку второй способ проще, мы воспользуемся им снова. Установите курсор на первый теплообменник и дважды щёлкните левой кнопкой мыши. На экране появляется диалоговое окно ввода параметров для данной единицы оборудования (рис. 10.20).

Экраны ввода данных могут иметь длину более одной страницы. Для переключения между страницами в данном окне диалога служат вкладки Specifications (Задание параметров), Misc. Settings (Задание различных параметров) и Cost Estimations (Оценка стоимости). Щёлкнув мышью по вкладке, Вы можете перейти к требуемой странице.

*Теперь мы приступим к заполнению полей экрана ввода данных.* Перепад давления между входом и выходом для обеих сторон теплообменника равен 5 psi, поэтому для ввода первого значения перепада давления нажмите клавишу 5, а затем щёлкните по второму полю ввода значения перепада давления с обозначением Stream 4 (Поток 4). Введите и в это поле значение 5.

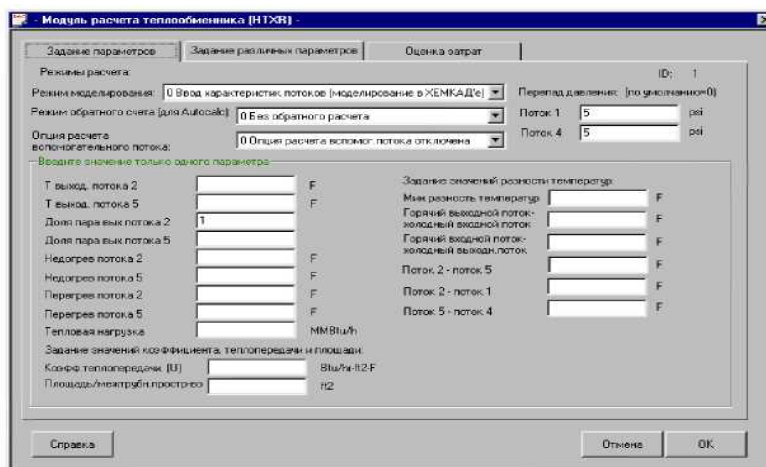


Рис. 10.20

В нашем случае поток на первом выходе теплообменника должен находиться в точке росы. Эту ситуацию можно описать, задав долю пара на выходе равной 1. Перейдите в поле Vapor Fraction stream 2 (Доля пара для потока 2) (для этого Вы можете использовать клавишу табуляции либо щёлкнуть по данному полю мышью). Введите в него значение 1.

На этом ввод данных для теплообменника завершается. Нам необходимо сохранить введённую информацию и закрыть окно диалога. Для этого достаточно щёлкнуть мышью по кнопке ОК.

*Задание параметров второго теплообменника.* Теперь мы можем выбрать следующую единицу оборудования для ввода её параметров. Переместите курсор на второй теплообменник и дважды щёлкните левой кнопкой мыши. На экране появляется окно ввода данных для теплообменника с одним входным потоком.



На экране появляется меню ввода данных для одностороннего теплообменника. Температура на выходе из этого теплообменника определяет количество жидкости, удаляемой в испарителе, а оно, в свою очередь, определяет критическую температуру конденсации (точку росы) газообразного продукта. Таким образом, температура на выходе из теплообменника представляет собой один из важнейших параметров, используемых в нашем расчёте. Для первого цикла расчёта примем температуру на выходе из данного теплообменника равной 5 °F. Введите в поле Pressure Drop (Перепад давления) значение 5, а в поле Temperature of Stream 3 (Температура потока 3) – значение 5. После этого щёлкните по кнопке ОК для сохранения введённых данных и закрытия окна диалога.

**Задание параметров испарителя.** В нашем примере испаритель используется как сепаратор для разделения жидкости и пара, поэтому для него не нужно задавать каких-либо параметров. Таким образом, нам не придётся вводить данные для этой единицы оборудования.

**Задание параметров для клапана.** Далее мы задаём значение давления на выходе из клапана. Переместите курсор на изображение клапана на схеме и дважды щёлкните левой кнопкой мыши. На экране появится диалоговое окно Valve (Клапан). Давление на выходе из клапана равно 125 psia, поэтому введите в поле Pressure Out (Давление на выходе) значение 125 и нажмите кнопку (ОК). Этим завершается ввод данных для клапана.

**Задание параметров колонны.** Дважды щёлкните мышью по пиктограмме колонны. На экран выводится диалоговое окно TOWER Distillation Column (Модуль расчёта ректификационной колонны – TOWER). По числу вкладок мы видим, что в этом окне пять страниц (рис. 10.21).

На первой странице нам нужно ввести значение давления наверху колонны (top pressure), равное 125 psia; падения давления в колонне (column pressure drop), равное 5 psi; число тарелок (number of stages), равное 12, и положение (номер) тарелки питания (feed stage location); это тарелка 1. Итак, заполните первую страницу экрана, как это показано на рис. 10.22.

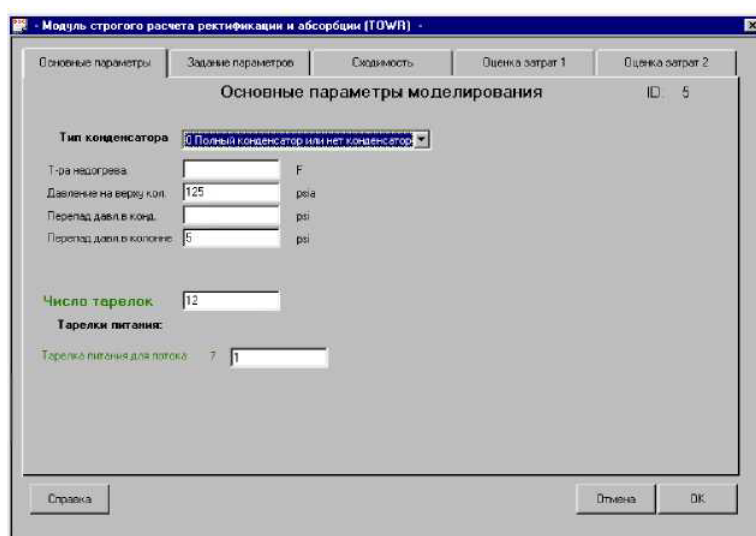


Рис. 10.21

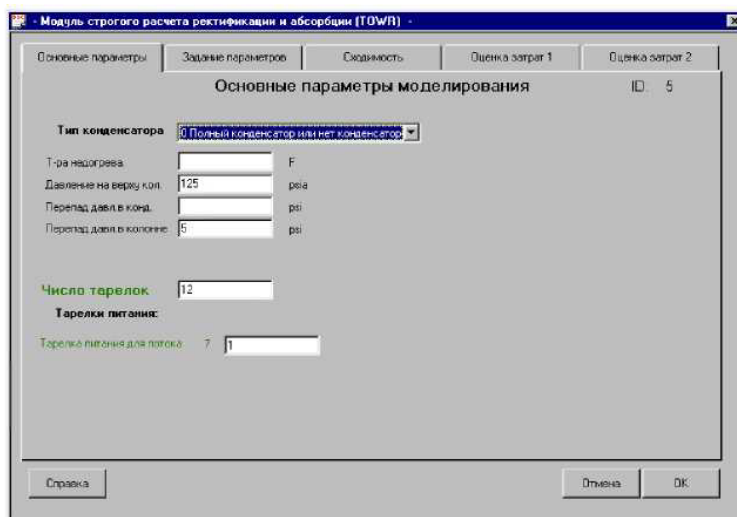


Рис. 10.22

После этого мы продолжим ввод данных на следующей странице. Щёлкните по вкладке Specifications (Задание параметров). На этой странице мы задаём параметры колонны. В нашей колонне отсутствуют конденсатор и боковые потоки, поэтому требуется ввести значения параметров только для ребойлера.

Прежде всего необходимо задать режим работы кипятильника. Для просмотра существующих вариантов нужно установить курсор в поле, расположенное под заголовком Select Reboiler Mode (Выбор режима работы ребойлера) и нажать левую кнопку мыши. На экране должно появиться окно, содержащее список имеющихся опций.

Необходимо задать для колонны расход потока с низа ребойлера; этот режим обозначен в списке как Mode No. 4 (Режим № 4). Таким образом, Вам нужно подвести курсор к строке 4 Bottom mole flowrate (Мольный расход потока с низа ребойлера) и щёлкнуть по ней левой кнопкой мыши. При этом список закрывается, а в поле выбора режима работы появляется запись 4 Bottom mole flowrate (Мольный расход потока с низа ребойлера).

Теперь нам нужно задать численное значение этого параметра. Для этого служит поле справа от поля выбора режима работы, которое становится доступным при завершении выбора режима работы. Установите курсор в это поле и щёлкните левой кнопкой мыши. При этом данное поле выделяется подсветкой, и мы можем ввести в него значение расхода, равное 30.

Теперь, щёлкнув мышью по вкладке Convergence (Сходимость), мы перейдём к последней странице этого экрана ввода данных. Как вы видите, для всех полей этой страницы ввод данных не является обязательным. Мы, однако, с целью демонстрации работы данной опции введём ориентировочные значения температуры для верха и низа колонны (соответственно 50 и 150 °F). Для этого сначала укажите курсором на поле T top (Тверх) и введите в это поле значение 50. После этого перейдите к находящемуся под ним полю T bottom (Тниз). Введите в этом поле значение 150.

Тем самым мы завершили ввод данных для колонны. Щёлкните по кнопке ОК для сохранения этих данных. При этом Вы увидите на экране предупреждение о том, что Вы не ввели начальное приближение для скорости ректификации. В выводимом на экран диалоговом окне программа запрашивает подтверждение того, что Вы игнорируете данное предупреждение. Предупреждающие сообщения служат для информации и обычно могут быть проигнорированы, поэтому нажмите кнопку YES (Да). При этом Вы возвратитесь к работе в экранном окне Simulation (Моделирование). Ввод данных для нашей технологической схемы полностью завершён.

**Запуск моделирования ХТС.** Для запуска программы моделирования щёлкните мышью по команде RUN (Счёт) в строке меню. При этом открывается падающее меню RUN (Счёт), показанное на рис. 10.23.

Мы хотим выполнить расчёт стационарного состояния, поэтому необходимо выбрать в меню опцию Run All (Расчёт всей схемы).

Вначале программа проверяет введённые Вами данные и выводит на экран список обнаруженных ошибок и/или предупреждающие сообщения. В данном случае ошибок быть не должно; в то же время на экране появляются предупреждения о том, что нами не введены начальные приближения для некоторых параметров. Мы можем проигнорировать эти сообщения и продолжить работу, для чего следует нажать кнопку YES (Да). При этом начнется выполнение расчёта.

По окончании расчёта на экране появляется окно сообщений ХЕМКАД (CC5 Message Box), содержащее сообщение «Recycle calculation has converged» («Расчёт рецикла сошёлся»). Щёлкните по кнопке ОК для закрытия данного окна и удаления его с экрана.

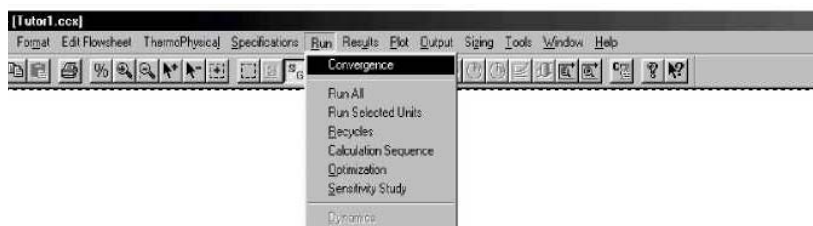


Рис. 10.23

**Просмотр результатов.** Теперь, закончив моделирование, мы должны просмотреть результаты перед их распечаткой. Для этого служат команды и Results (Результаты) и Plot (График) в строке меню. При помощи этих команд мы можем проверить, удалось ли нам выполнить проектные условия.

Если мы правильно выбрали значение температуры на выходе из теплообменника 2, то значение наивысшей точки росы для потока газообразного продукта помните, наивысшая точка росы – это для данной газовой смеси при любом этом параметра для нашего на график всех температур в точке Построим эту диаграмму (рис. 10.24).

Построение графика в ХЕМКАД строке меню. Выберите эту опцию, PLOT (График). В этом меню Вы заложенных в программу. Выберите в этого нужно щёлкнуть по ней мышью

На экране вновь появится окно курсор к линии, изображающей поток теплообменника 1), и один раз появится цифра 5. Теперь нажмите кнопку выводится диалоговое окно Phase диаграмм), которое изображено на рис.

Поскольку нам нужно только странице никаких данных. Однако для зададим отображение на нём (помимо соответствующих значениям доли пара,

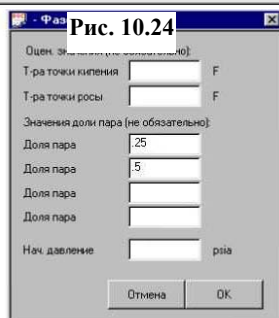
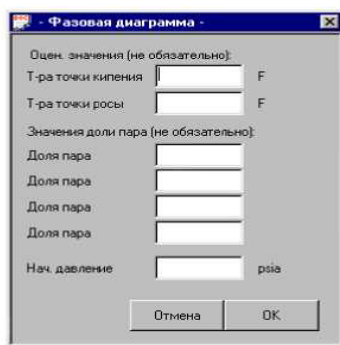


Рис. 10.24

(поток 5) будет равно (или ниже) 20 °F. Как Вы максимальная температура точки росы, возможная давлении. Самый простой способ определения газообразного продукта заключается в нанесении росы, т.е. в построении фазовой диаграммы.

начинается с вызова команды Plot (График) в щёлкнув по ней мышью. На экране появится меню увидите перечень основных типов графиков, нём опцию Envelopes (Фазовые диаграммы); для или нажать клавишу E.

диалога Select streams (Выбор потоков). Подведите 5 (это поток газообразного продукта снизу щёлкните по ней мышью. В поле окна диалога ОК для завершения выбора потоков. На экран Envelope Options (Опции построения фазовых 10.25.

смотреть график точек росы, мы не вводим на этой того, чтобы сделать график более наглядным, мы обычных границ фазовой диаграммы) линий, равным 0,25 и 0,5. Итак, заполните диалоговое

окно, как это показано на рис. 10.25, а затем нажмите кнопку ОК для сохранения введённых данных.

ХЕМКАД выполнит расчёты испарения, необходимые для построения фазовой диаграммы по условиям расчёта. Результаты будут представлены в двух форматах:

1. В виде таблицы, включающей значения температуры, давления, доли пара, коэффициента сжимаемости пара и коэффициента сжимаемости жидкости.

2. В виде графика зависимости давления от температуры для каждого из заданных значений доли пара.

Для отображения результатов в первом из этих форматов используется окно редактора WordPad (Блокнот), а для их отображения в графическом виде – окно Plot (График). Поскольку данные для этих окон генерируются одновременно, оба они будут открыты на экране. Поэтому после завершения расчётов ХЕМКАД выводит на экран окно Plot (График), а затем по прошествии непродолжительного времени открывает окно редактора WordPad (Блокнот).

Ввиду того, что мы не будем использовать представление результатов в табличной форме, окно редактора WordPad (Блокнот) необходимо закрыть. Вид экрана показан на рис. 10.26.

Теперь Вы работаете в экранном окне графиков, и предоставляемый Вам программой набор команд изменился. В сущности, поскольку для любого графика вид данного окна одинаков, его можно также назвать окном редактирования графиков. Наш график закончен. Для распечатки содержимого экрана щёлкните мышью по экранной кнопке Print (Печать).

На этом мы заканчиваем построение графика для нашего учебного примера. Нам нужно закрыть текущее экранное окно и возвратиться к работе в главном окне. Нажмите для этого кнопку закрытия окна

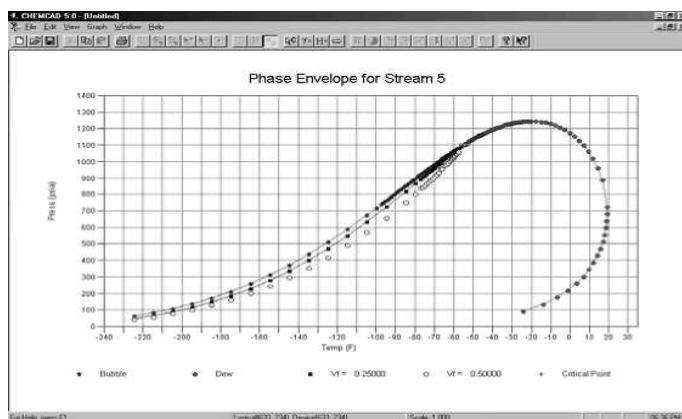


Рис. 10.26

(крайняя справа во второй (нижней) строке). Нажав её, Вы возвратитесь в главное окно ХЕМКАД.

*Проверка качества потока отбираемого из куба.* В качестве второго условия нашей задачи моделирования было принято, что содержание пропана в потоке 9 должно быть равным 1 %. При помощи команды Results (Результаты) мы можем проверить, удовлетворяет ли проведённый расчёт этому условию. Выберите щелчком мыши команду Results (Результаты) или нажмите клавиши ALT + U. При вызове данной команды на экран выводится меню просмотра результатов (Results).

Для просмотра состава потоков в мольных процентах нужно сначала задать единицы измерения состава. Выберите щелчком мыши опцию меню Set Flow Units (Единицы измерения параметров потока). На экране появится окно диалога Report Flow Rate Units (Единицы измерения расхода для отчёта). Спуститесь по списку вниз и щёлкните мышью по опции Mole % (Мольные %). Затем нажмите кнопку ОК. При этом Вы возвратитесь в главное окно ХЕМКАД.

Снова щёлкните мышью по опции Results (Результаты). В появившемся меню просмотра выделите подсветкой пункт Stream Compositions (Состав потоков). В выводимом на экран падающем меню STREAM COMPOSITIONS (Состав потоков) щёлкните мышью по опции Select Streams (Выбор потоков). На экране появится окно диалога Select Streams (Выбор потоков). Как и ранее, установите курсор мыши на строку Stream 9 (поток 9) и щёлкните один раз левой кнопкой мыши. Затем щёлкните по кнопке (ОК). Вид экрана будет таким, как показано на рис. 10.27.

Мы видим, что содержание пропана намного выше заданного нами значения, равного 1 %. Это означает, что в нашем расчёте мы не смогли правильно задать значения для ключевых параметров. Чтобы это исправить, мы вернёмся назад и повторим процедуру задания параметров колонны, с тем чтобы получить концентрацию пропана в кубе, равную в точности 1 %.

Component	Value
Stream No.	9
Stream Name	
Temp F	214.2975
Press psia	130.0000
Dens lb/cu ft	-2.0871
Vapor mole fraction	0.00000
Total lbmol/hr	30.0001
Total lb/hr	2187.0386
Total std l x 10 <sup>3</sup> /hr	35.0468
Total std W scfd	11304.81
Component mole %	
Hydrogen	0.000000
Methane	0.000000
Ethane	0.000396
Propane	0.137826
i-Butane	0.251300
n-Butane	0.035646
i-Pentane	36.489733
n-Pentane	16.393547
n-Hexane	33.260040

Рис. 10.27

Щёлкните мышью один раз по кнопке (Закрыть).



*Повторный запуск моделирования.* При повторном запуске моделирования стабилизатора конденсата мы зададим концентрацию пропана в кубовом продукте, равную 1 %. Для повторного запуска моделирования, прежде всего, дважды щёлкните по строке аппарата Tower (Колонна).

На экран снова выводится диалоговое окно ввода данных для ректификационной колонны (TOWR), в котором мы сможем повторить задание параметров стабилизатора конденсата.

На этот раз мы выберем в этом окне страницу Specifications (Задание параметров), щёлкнув мышью по соответствующей вкладке. Вместо мольного расхода кубового продукта (Bottom mole flowrate) мы хотим ввести здесь содержание компонента. Таким образом, мы должны начать с изменения задаваемого параметра. Чтобы это сделать, активируйте щелчком мыши поле, озаглавленное Select reboiler mode (Выбор режима работы ребойлера), и выберите в нём опцию Mode 6 (Режим 6). После этого в данном поле должна появиться запись 6 Bottom component mole fraction (Мольная доля компонента в кубовом остатке). Для завершения ввода данных нам необходимо задать значение концентрации и указать, для какого компонента оно задаётся. В поле Specification (Значение) справа мы введём значение .01 (вместо присутствующего в нём значения, равного 30). Затем нам нужно указать, для какого компонента задаётся значение концентрации. Для этого щёлкните по полю выбора компонента. На экране появится список всех компонентов, включённых в расчёт. Щелчком мыши выберите в нём пропан; при этом список компонентов закроется.

Выберите щелчком мыши третью страницу экрана. Поскольку ранее мы уже выполняли моделирование данного стабилизатора конденсата, нам нужно сделать так, чтобы программа использовала конечные результаты последнего моделирования в качестве начального приближения. Для этого следует ввести значение 1 в поле Initial flag (Признак профиля) опции Convergence parameters (Параметры сходимости). Щёлкните мышью в этом поле. Открывается список всех имеющихся опций. Нам нужна первая из них – опция перезагрузки профиля колонны (Reload column profile).

Нажмите кнопку ОК для сохранения этих изменений.

Выберите в строке меню опцию Run (Счёт). На экране вновь появляется меню Run (Счёт). Здесь мы хотели бы обратить Ваше внимание на то, что, поскольку изменения затрагивают только сам стабилизатор конденсата, нет необходимости повторять моделирование для всей схемы. Ввиду этого мы проведём моделирование только для аппарата 5 (Unit 5), т.е. для стабилизатора конденсата. Для этого нужно выбрать в меню опцию Run Selected Units (Расчёт выбранных единиц оборудования).

Когда мы в первый раз открыли диалоговое окно ввода данных для ректификационной колонны, мы «выбрали» в нём единицу оборудования 5 Tower (Колонна). После закрытия окна диалога единица оборудования 5 осталась «выбранной», несмотря на то, что диалоговое окно ввода данных для неё было закрыто. Поэтому в результате ввода команды Run Selected Units (Расчёт выбранных единиц оборудования) программа немедленно выполнит расчёт единицы оборудования 5 (поскольку она была «выбрана» ранее). На то, что объект выбран, указывают четыре маркера, которые окружают его, образуя прямоугольник.

Щёлкните мышью по опции Run Selected Units (Расчёт выбранных единиц оборудования).

После завершения расчёта в левой части нижней строки окна ХЕМКАД появится сообщение «Calc Unit 5 TOWR» («Расчёт аппарата 5 TOWR»). Поскольку расчёт стабилизатора конденсата выполняется очень быстро, это сообщение практически сразу же появляется на экране.

Теперь нам нужно убедиться в том, что содержание пропана в потоке кубового остатка действительно равно 1 %. Мы сделаем это с помощью команды Results (Результаты). Выберите в строке меню команду Results (Результаты); при этом на экран будет выведено соответствующее меню.

Выделите в нём подсветкой опцию Stream Compositions (Состав потоков) и вызовите на экран параметры потока 9. Для этого:

1. Выберите опцию Select Streams (Выбор потоков).
2. Установите курсор на линию потока 9 и нажмите левую кнопку мыши.
3. Щёлкните мышью по кнопке ОК.

В окне редактора WordPad (Блокнот) отобразятся данные для потока 9. Мы видим, что концентрация пропана равна 1 %, как и было задано.

Чтобы убрать с экрана отображение состава потоков, нажмите кнопку закрытия окна редактора WordPad (Блокнот).

*Выдача отчета.* Для создания любой распечатки (твёрдой копии результатов) используется опция строки меню Output (Вывод). Щёлкните по ней мышью или нажмите клавиши ALT + O. На экране появится меню функции Output (Вывод), предоставляющее пользователю следующие опции:

1. Report (Отчёт) – распечатка результатов в табличной форме.
2. Main PFD (Основная диаграмма) – построение и редактирование основной (первой) диаграммы технологического процесса.

Для вывода отчёта на печать щёлкните по кнопке Print (Печать) панели инструментов. После того как создание отчёта закончено, закройте окно редактора WordPad (Блокнот) щелчком по соответствующей кнопке в правом верхнем углу окна. На экране вновь появится меню Report (Отчёт). При желании Вы можете приступить к созданию следующего отчёта. В данном случае мы закроем меню отчёта, щёлкнув по опции End Report (Конец отчёта). При этом программа возвращает Вас в главное окно ХЕМКАД.

## Заключение

*В данном учебном пособии авторы постарались представить основные идеи по моделированию химико-технологических систем: типовые технологические операторы ХТС, виды технологических связей между операторами, свойства ХТС, задачи проектирования и синтеза ХТС. Отдельно рассмотрены Основные методы расчёта ХТС, способы представления ХТС в виде графов, матриц и таблиц. Основное внимание в пособии уделено использованию пакета ChemCAD для моделирования ХТС. Использование этого пособия позволит разрабатывать сложные схемы технологических производств на современном уровне, с учётом требований экономической эффективности и безопасности.*

## СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Кафаров, В.В. Принципы математического моделирования химико-технологических систем / В.В. Кафаров, В.Л. Перов, В.П. Мешалкин. – М. : Химия, 1974. – 344 с.
2. Бояринов, А.И. Методы оптимизации в химической технологии / А.И. Бояринов, В.В. Кафаров. – М. : Химия, 1973. – 564 с.
3. Кафаров, В.В. Математические основы автоматизированного проектирования химических производств: Методология проектирования и теория разработки оптимальных технологических схем / В.В. Кафаров, В.П. Мешалкин, В.Л. Перов. – М. : Химия, 1979. – 320 с.
4. Химико-технологические системы. Синтез, оптимизация, управление / под. ред. И.П. Мухленова. – Л. : Химия, 1986. – 424 с.
5. Саулин, Д.В. Математическое моделирование химико-технологических систем : конспект лекций / Перм. гос. техн. ун-т. – Пермь, 2003. – 91 с.
6. Методы и средства автоматизированного расчёта химико-технологических систем / Н.В. Кузичкин, С.Н. Саутин, А.Е. Пунин и др. – Л. : Химия, 1987. – 152 с.
7. Амирова, С.А. Основы теоретического анализа химико-технологических процессов : методические рекомендации / С.А. Амирова, С.В. Островский. – Екатеринбург : УрО РАН, 1992. – Ч. I, II.
8. Островский, Г.М. Оптимизация химико-технологических процессов. Теория и практика / Г.М. Островский, Т.А. Березинский. – М. : Химия, 1984. – 240 с.
9. Банди, Б. Методы оптимизации. Вводный курс : пер. с англ. / Б. Банди. – М. : Радио и связь, 1988. – 128 с.
10. Зыков, А.А. Теория конечных графов / А.А. Зыков. – Новосибирск, 1969. – Т. 1.
11. Яцимирский, К.Б. Применение теории графов в химии / К.Б. Яцимирский. – Киев, 1973.
12. CHEMCAD и SS-BATCH. Руководство пользователя и руководство по обучению. Chemstations Inc. – 2005. – 115 с.

### оглавление

введение .....	3
1. Общая характеристика химико-технологической системы .....	4
2. Типовые технологические операторы химико-технологических систем .....	8
3. Виды технологических связей между операторами .....	8
4. Свойства химико-технологических систем .....	12
5. Задачи проектирования химико-технологических систем .....	14
6. Синтез химико-технологических систем .....	16
7. Основные методы расчета химико-технологической системы. Интегральные и декомпозиционные методы расчета химико-технологических систем .....	22
8. Представление химико-технологической системы в виде графов, матриц и таблиц .....	27
9. <i>Детерминированные и статистические модели элементов химико-технологической системы</i> .....	37
10. Использование пакета ChemCAD для моделирования химико-технологических систем .....	46
заключение .....	78
Список использованной литературы .....	79