

Міністерство освіти і науки України
ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ "ОДЕСЬКА ПОЛІТЕХНІКА"

**МЕТОДИ АВТОМАТИЗОВАНИХ РОЗРАХУНКІВ
ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ**

Навчальний посібник

Затверджено на засіданні кафедри ТНРЕ
Протокол № 11, від 24.05.2021 р.

Одеса: ОП, 2021

Брем, В. В. Методи автоматизованих розрахунків хіміко-технологічних систем : навч. посібник / В. В. Брем, О. В. Макаров ; Держ. ун-т "Одес. політехніка". - Одеса, 2021. - 230 с.

Автори: Брем В.В., к.х.н., доцент,
Макаров О.В.

В. В. Брем, О. В. Макаров. Методи автоматизованих розрахунків хіміко-технологічних систем : навч. посібник. У навчальному посібнику систематизовано відомий матеріал щодо методів автоматизованих розрахунків складних хіміко-технологічних систем, доповнено його прикладами навчальних завдань. Приведено алгоритми і програми реалізовані сучасною мовою C++, надано поради з їх практичного використання. Навчальний посібник призначено для здобувачів вищої освіти усіх форм навчання за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія.

ЗМІСТ

<i>ПЕРЕДМОВА</i> -----	5
1. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ І ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ -----	7
1.1. ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНА СИСТЕМА. ПОНЯТТЯ, МЕТА І ПОКАЗНИКИ ЕФЕКТИВНОСТІ ФУНКЦІОНУВАННЯ -----	7
1.2. СПОСОБИ ПРЕДСТАВЛЕННЯ ХТС-----	10
1.3. ОСНОВНІ ТИПИ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ЗВ'ЯЗКІВ -----	14
1.4. ЗАГАЛЬНА ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ АНАЛІЗУ, СИНТЕЗУ І ОПТИМІЗАЦІЇ ХТС -----	18
1.5. КЛАСИФІКАЦІЯ ЗМІННИХ ВЕЛИЧИН, ЩО ХАРАКТЕРИЗУЮТЬ РОБОТУ ХТС-----	22
1.6. ВЛАСТИВОСТІ ХТС -----	24
1.7. ПРИКЛАДИ ЗАДАЧ -----	25
1.7.1. Розрахунок оптимального числа реакторів у каскаді РІЗ -----	25
1.7.2. Розрахунок технологічної схеми з реактором каталітичного газоочищення і теплообмінником-рекуператором та оцінка області стійкої роботи схеми-----	33
2. АНАЛІЗ ХТС -----	48
2.1. СПОСОБИ ПРЕДСТАВЛЕННЯ СТРУКТУРИ ХТС -----	48
2.2. ПОНЯТТЯ ПРО РОЗРАХУНОК РОЗІМКНУТИХ І ЗАМКНУТИХ ХТС -----	51
2.3. АЛГОРИТМ ЗНАХОДЖЕННЯ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОЇ ПОСЛІДОВНОСТІ РОЗІМКНУТОЇ СИСТЕМИ -----	55
2.4. АЛГОРИТМИ СТРУКТУРНОГО АНАЛІЗУ ЗАМКНУТИХ ХТС -----	56
2.4.1. Виділення комплексів на графі -----	56
2.4.2. Виділення контурів, що входять до складу комплексу -----	59

2.4.3. Знаходження оптимально-розриваючої множини дуг -----	61
2.5. ПРИКЛАДИ ЗАДАЧ -----	64
2.5.1. Визначення обчислювальної послідовності розімкнутої системи	64
2.5.2. Аналіз структури ХТС-----	71
3. МЕТОДИ РОЗРАХУНКУ МАТЕРІАЛЬНИХ І ТЕПЛОВИХ БАЛАНСІВ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ -----	80
3.1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ-----	80
3.2. СКЛАДАННЯ СИСТЕМ РІВНЯНЬ БАЛАНСІВ ХТС-----	80
3.3. КЛАСИФІКАЦІЯ МЕТОДІВ РІШЕННЯ МАТЕРІАЛЬНО-ТЕПЛОВИХ БАЛАНСІВ ХТС -----	83
3.4. ІТЕРАЦІЙНИЙ МЕТОД РОЗРАХУНКУ ХТС -----	84
3.5. ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ, ЩО ВИКОРИСТОВУЮТЬСЯ ПРИ РОЗРАХУНКУ МТБ ХТС ІТЕРАЦІЙНИМ МЕТОДОМ-----	89
3.6. МАТРИЧНИЙ (БЕЗІТЕРАЦІЙНИЙ) МЕТОД РОЗРАХУНКУ ХТС -----	93
3.7. ПРИКЛАДИ ЗАДАЧ -----	104
3.7.1. Матеріальні розрахунки хіміко-технологічних схем-----	104
3.7.2. Розрахунок циркуляційного тракту процесу гідроочищення дизельних палив -----	117
4. ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ СТВОРЕННЯ І РОБОТИ МОДЕЛЮЮЧИХ ПРОГРАМ ДЛЯ РОЗРАХУНКУ ХТС -----	138
4.1. ВИМОГИ, ПРОПОНОВАНІ ДО МОДУЛІВ -----	138
4.2. ПОБУДОВА ДЕТЕРМІНОВАНИХ МАТЕМАТИЧНИХ ОПИСІВ ЕЛЕМЕНТІВ ХТС--	140
4.2.1. Змішувач потоків -----	141
4.2.2. Роздільник потоків -----	142
4.2.3. Теплообмінник -----	143
4.2.4. Абсорбер -----	144
4.2.5. Реактор-----	146
4.3. МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ХІМІЧНИХ РЕАКТОРІВ І АЛГОРИТМИ РІШЕННЯ-----	146
4.3.1. Модель реактора ідеального змішання-----	146
4.3.2. Модель реактора ідеального витиснення -----	148
4.3.3. Дифузійна модель з подовжнім переносом речовини і тепла ----	150
4.3.4. Двопараметрична дифузійна модель -----	151
4.3.5. Двофазна модель процесу в шарі каталізатора -----	152
4.3.6. Методи рішення лінійної крайової задачі для звичайних диференціальних рівнянь -----	154
4.3.6.1. Метод кінцевих різниць -----	155
4.3.6.2. Метод прогону-----	157
4.4. ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНИХ ОПИСІВ ЕЛЕМЕНТІВ ХТС СТАТИСТИЧНИМИ МЕТОДАМИ-----	159
4.4.1. Побудова лінійних регресійних моделей елементів ХТС на основі планів першого порядку -----	160
4.4.2. Розробка нелінійних регресійних моделей -----	165
4.4.3. Побудова моделей на основі ОЦКП -----	168

4.4.4. Побудова мультиплікативних регресійних моделей на основі даних пасивного експерименту-----	171
4.5. ПРИКЛАДИ ЗАДАЧ -----	172
4.5.1. Розрахунок та оптимізація трубчастого реактора окислення метанолу -----	172
4.5.2. Розрахунок і оптимізація параметрів роботи агрегату одержання безметанольного формаліну -----	182
4.5.3. Побудова математичного опису елементів технологічної схеми	190
<i>СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ</i> -----	195
<i>ДОДАТКИ</i> -----	196

ПЕРЕДМОВА

Однією з основних задач хімічної технології являється підвищення ефективності виробництва при одночасному зведенні до мінімуму шкідливого впливу на навколишнє середовище. Рішення цієї задачі може бути досягнуто розробкою новітніх високоінтенсивних хіміко-технологічних процесів, створенням безвідхідних виробництв, агрегатів великої одиничної потужності й удосконалюванням діючих виробництв. Реалізація кожного з рішень припускає створення технологічних схем, що забезпечують проведення процесів в оптимальному режимі, комплексну і більш повну переробку сировини, утилізацію фізичної теплоти матеріальних потоків і теплоти екзотермічних реакцій. Останнє пов'язано з розробкою замкнутих технологічних циклів по матеріальним і енергетичним потокам, при цьому організація матеріальних і енергетичних потоків повинна забезпечити передачу виробництву функцій керування. Замкнуті технологічні цикли по матеріальним і енергетичним потокам дозволяють звести до мінімуму кількість шкідливих викидів у навколишнє середовище.

Успішно вирішити комплекс перерахованих завдань можна спираючись на теорію аналізу і синтезу хіміко-технологічних систем. Основним питанням цієї теорії є розробка методів, що дозволяють передбачати характеристики виробництва в цілому на основі вивчення особливостей функціонування окремих апаратів, їх характеристик і аналізу механізму взаємодії між апаратами. Практична реалізація цих методів знаходиться в повній залежності від наявності математичних моделей апаратів і виробництв у цілому, що досить адекватно описують специфіку їх роботи.

Сучасні обчислювальні методи і швидкодіючі персональні комп'ютери відкривають нові можливості з використання математичних моделей процесів різної фізико-хімічної природи і складності. На основі таких моделей, що відбивають сутність технологічних процесів, створюється математичне і програмне забезпечення для їх розрахунку та оптимізації.

Усе це накладає додаткові вимоги до підготовки фахівців-технологів. Крім досконалого знання хімічної технології їм необхідно володіти методами програмування, обчислювальної математики, автоматизованого проектування, умінням раціонально використовувати ЕОМ, аналізом альтернативних варіантів проектних рішень і вибору найкращого з них.

У практичній роботі у користувачів математичних моделей виникають істотні труднощі, зв'язані з особливостями постановки задач, програмною несумісністю і таке інше.

У навчальному посібнику систематизовано відомий матеріал щодо методів автоматизованих розрахунків складних хіміко-технологічних систем, доповнено його прикладами з навчальними завданнями, що сприяє закріпленню знань і набуттю практичних навичок. Приведені алгоритми і програми, які реалізовані сучасною мовою C++, надані рекомендації з їхнього практичного використання.

Книга складається з 4 глав, як комплексний посібник.

У главі 1 представлені основи теорії хіміко-технологічних систем: основні поняття, види образотворчих моделей, основні типи технологічних зв'язків, класифікація змінних величин, що характеризують роботу ХТС, властивості складних систем, постановка задач аналізу, синтезу й оптимізації ХТС.

Глава 2 присвячена аналізу структури ХТС. Розглянуті способи представлення структури ХТС, особливості розрахунків розімкнутих і замкнутих систем, алгоритм знаходження обчислювальної послідовності розімкнутої системи, алгоритми структурного аналізу замкнутих ХТС – виділення комплексів на графі, виділення контурів, що входять до складу комплексу, знаходження оптимально-розриваючої множини дуг та визначення остаточної послідовності розрахунку ХТС.

У главі 3 розглянуті методи розрахунку матеріальних і теплових балансів хіміко-технологічних систем: складання систем рівнянь балансів ХТС, класифікація методів рішення матеріально-теплових балансів ХТС, ітераційний метод розрахунку та чисельні методи, що використовуються при розрахунку цим методом, матричний (безітераційний) метод розрахунку ХТС.

У главі 4 описані основні принципи створення і роботи моделюючих програм для розрахунку ХТС. Розглянуті вимоги до модулів, питання побудови детермінованих математичних описів елементів ХТС. Окремо приведені математичні моделі хімічних реакторів і алгоритми рішення технологічних задач. Розглянуті питання побудови лінійних та нелінійних регресійних моделей елементів ХТС статистичними методами.

1. ОСНОВНІ ПОНЯТТЯ І ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ

У даному розділі буде викладено основні поняття хіміко-технологічних систем, приведено їхні образотворчі моделі в залежності від мети відображення об'єкта і типів технологічних зв'язків, розглянута загальна постановка задач аналізу і синтезу хіміко-технологічних систем при розрахунку проєктованих і оптимізації діючих виробництв.

1.1. ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНА СИСТЕМА. ПОНЯТТЯ, МЕТА І ПОКАЗНИКИ ЕФЕКТИВНОСТІ ФУНКЦІОНУВАННЯ

Хіміко-технологічна система (ХТС) — це сукупність елементів, взаємозв'язаних технологічними потоками і функціонуючих як одне ціле з загальною метою забезпечити економічно доцільну переробку сировини в корисний продукт.

Хімічне підприємство, цех, дільниця, апарат являють собою сукупність взаємозв'язаних елементів, у яких здійснюється цілеспрямований вплив на технологічні потоки. Вони можуть розглядатися як ХТС різного ступеня складності. *Складність системи* визначається її *структурою, числом елементів, зв'язків, рівнів та обсягом інформації*, закладеної в систему. Умовно за ступенем складності хімічні системи поділяють на **малі** і **великі**. *Малі системи* звичайно обмежені одним типовим процесом, вони однозначно визначаються властивостями цього процесу. *Великі системи* являють собою сукупність малих, мають певну цілісність, визначаються наявністю загальних цілей і призначення. Вони мають значні розміри, виконують велике число функцій, їм властива складність поведінки. До великих хімічних систем відносять цех, завод, виробниче об'єднання.

Елемент системи являє собою самостійну, умовно неподільну частину. Однак поняття елемента системи неоднозначне. Так, якщо як систему розглядати апарат, то його елементами є окремі вузли (наприклад, тарілки ректифікаційної колони), а якщо системою є технологічний блок, то її елементами служать окремі апарати. При розгляді хімічного підприємства як системи елементами будуть технологічні цехи. Надалі *під елементом* будемо розуміти *апарат, у якому протікає який-небудь типовий хіміко-технологічний процес*. За цією ознакою класифікації елементи бувають: **механічні** (змінюється форма, розміри вихідної сировини); **фізичні** (змінюється фізичний стан без зміни хімічного складу сировини); **хімічні** (змінюється хімічний склад); **енергетичні** (перетворюється енергія); **комбіновані** (відбувається хімічна реакція з відводом теплоти). Це все окремі апарати.

Між елементами системи завжди існує функціональний взаємозв'язок у вигляді технологічних потоків. *Технологічний потік* — це переміщення в просторі маси й енергії. Потоки бувають **матеріальні та енергетичні**. Фізично

ці потоки можуть існувати разом. *Сукупність елементів і зв'язків утворює структуру системи.*

Взаємозв'язок елементів можна проілюструвати на такому прикладі. Є система, що складається з хімічного реактора та апарата для поділу суміші. При досягненні в реакторі високого ступеня перетворення зменшується навантаження на апарат для поділу. І навпаки, при низьких ступенях перетворення збільшується навантаження на апарат для поділу. Очевидно, існує оптимальний компромісний варіант, що може бути знайдений при вивченні системи в цілому.

Сукупність елементів, що є в деякому роді самостійно функціонуючою частиною системи, розглядають як *підсистему*. Так, наприклад, сукупність чотирьох елементів ХТС – барботажної концентраційної колони, випарника розведеної азотної кислоти, конденсатора і холодильника – утворить систему концентрування азотної кислоти, що, у свою чергу, є підсистемою складної ХТС для виробництва азотної кислоти. Правильне виділення підсистем у складній ХТС полегшує розрахунок системи в цілому.

У будь-якій системі в деякому інтервалі часу відбувається зміна становищ. Це явище називають процесом *функціонування системи*. *Стан системи визначають набором вихідних її змінних. Вихідними змінними ХТС* служать фізичні параметри (показники) матеріальних і енергетичних потоків хімічних продуктів на виході із системи. Значення вихідних змінних залежать від величини вхідних змінних ХТС. *Вхідними змінними ХТС* є фізичні параметри вхідних потоків сировини і вхідних матеріалів, а також параметри різних фізико-хімічних впливів навколишнього середовища на процес функціонування системи (температура, тиск і т.п.).

Таким чином, кожен елемент ХТС здійснює перетворення, що може бути представлено функціональною залежністю

$$Y = F(X, U), \quad (1.1)$$

де Y , X – вектори параметрів стану вихідних і вхідних потоків, U – вектор управлінь.

Процес функціонування системи обумовлюється *параметрами системи і параметрами технологічного режиму елементів*. *Параметри системи* підрозділяють на **конструкційні** (об'єм хімічного реактора, перетин апарата, діаметр і висота шару насадки в масообмінних апаратах і т.д.) і **технологічні** (константи швидкості хімічних реакцій, ступінь перетворення, ступінь поділу, коефіцієнти тепло- і масообміну й ін.). *Параметри технологічного режиму елементів ХТС* – це сукупність факторів усередині елемента (температура, тиск, гідродинамічний режим і т.д.), що впливають на швидкість технологічного процесу, вихід і якість хімічних продуктів.

Про якість функціонування системи судять по *показникам ефективності*, під якими розуміють числові характеристики системи, що оцінюють ступінь її пристосування до виконання поставлених завдань. Щоб показник ефективності досить повно характеризував якість функціонування

ХТС, він повинен враховувати всі особливості і властивості системи, а також умови функціонування і взаємодії елементів, підсистем усередині ХТС із зовнішнім середовищем. Як показники ефективності функціонування ХТС найчастіше використовують *економічні* (собівартість, середній прибуток, приведений прибуток і т.д.) і *технологічні* критерії ефективності (вихід продукту, селективність процесу, ступінь перетворення, видаткові коефіцієнти по сировині, енергії). Поряд із зазначеними критеріями ефективності якість функціонування системи можна оцінити за *експлуатаційними* (надійність, безпека функціонування) і *соціальними* показниками (екологічна чистота виробництва, ступінь автоматизації). Усі ці показники характеризують функціонування системи наче з різних сторін. *Найбільш загальним* є економічний показник, оскільки його значення визначається технологічним, експлуатаційним і соціальним показниками. Вибір показника ефективності залежить від цілі функціонування системи, а остання визначається рівнем структури системи. Якщо в якості ХТС розглядати хімічний завод, то можна виділити три взаємозалежні підсистеми або три рівня структури ХТС. Кожен рівень структури ХТС має мету функціонування і характеризується визначеними показниками ефективності функціонування.

Перший рівень структури хімічного підприємства складають елементи ХТС, метою функціонування яких є визначений фізико-хімічний вплив на технологічні потоки. Показники ефективності функціонування елементів ХТС звичайно виражають у виді коефіцієнтів корисної дії апаратів та величин, що характеризують селективність процесу, ступінь перетворення чи ступінь витягу. Такий технологічний показник, як ступінь завершеності процесу в даному апараті, містить і соціально-економічну інформацію, оскільки характеризує роботу даного апарата з погляду придатності його для одержання продукту при мінімальних відходах. Отже, ним у визначеній мірі можна оцінити як економічну доцільність використання даного апарата у конкретному виробництві, так і його вплив на навколишнє середовище. Ефективність функціонування апарата можна охарактеризувати експлуатаційним показником. У процесі функціонування ХТС деякі елементи в результаті різного роду відмовлень або порушень працездатності можуть виходити з ладу. Надійність роботи елемента визначається його властивістю в даних умовах виконувати задані функції протягом визначеного інтервалу чи часу необхідного наробітку. Надійність окремих елементів обумовлює надійність функціонування ХТС у цілому.

Другий рівень структури утворюють хіміко-технологічні системи, що відповідають технологічним цехам. Ціль функціонування технологічних цехів полягає в одержанні встановленої кількості деякого цільового продукту для даного цеху. Показниками ефективності функціонування в даному випадку є видаткові норми на сировину, енергію. При оцінці ефективності функціонування технологічних цехів істотну роль грають показники економічної ефективності (собівартість продукції, прибуток).

Третій рівень структури являє собою взаємозалежну сукупність великого числа хімічних виробництв; допоміжних виробничих служб і підрозділів, що утворюють хімічний завод. Ціль функціонування заводу складається у виконанні виробничого плану з випуску заданого асортименту хімічної продукції відповідно до вимог стандартів і технічних умов. Ефективність функціонування хімічного заводу визначають узагальненими економічними показниками, наприклад, приведеним прибутком.

У ХТС на рівні сучасних виробництв здійснюється не тільки визначена комбінація основних технологічних операцій (підготовка сировини, хімічне перетворення, виділення цільових продуктів), але також регенерація вторинних сировинних і енергетичних ресурсів. Переробка відходів у вторинні матеріальні ресурси тісно зв'язана зі створенням безвідходних виробництв. Для ряду хімічних процесів регенерація енергетичних ресурсів обумовлена високим екзотермічним ефектом. Тому в хімічному виробництві ця теплота не тільки використовується, але і направляється на інші нестатки.

1.2. СПОСОБИ ПРЕДСТАВЛЕННЯ ХТС

В теорії ХТС структуру будь-якої системи можна представити образотворчими моделями: функціональними, структурними, технологічними та операторними схемами. Такі моделі дають загальне уявлення про процес функціонування, про елементи (підсистеми) системи в графічному вигляді. Кожна з перерахованих графічних моделей по різному описує ХТС. Вибір моделі залежить від мети відображення і розмірів об'єкта.

Функціональна схема ХТС складається з блоків, що представляють собою основні підсистеми даного виробництва, і технологічних зв'язків між ними (*рис. 1.1*). Ця схема дає загальне уявлення про систему, не несе інформації про типи елементів, їх конструкцію. Тому її доцільно використовувати на перших етапах проектування.

Структурна схема ХТС складається з блоків, що зображують елементи системи, і технологічних зв'язків між ними з указівкою напрямку руху матеріальних і енергетичних потоків (*рис. 1.2*). Ця схема дає загальне уявлення про функціонуючу або проєктовану систему, про послідовність технологічних процесів. Її доцільно використовувати на стадії розробки окремих підсистем, у ній чітко відображені потоки між елементами. Однак структурна схема, як і функціональна, не містить ніякої кількісної інформації про систему, не дає уявлення про типи елементів і їх конструкцію.

У **технологічній схемі** ХТС на відміну від структурної для зображення елементів використані загальноприйняті умовні позначки. Зв'язок між елементами відзначений лініями зі стрілками (*рис. 1.3*).

На схемі можуть бути приведені відомості про характер і склад речовин, які беруть участь у процесі. Технологічна схема містить інформацію про типи елементів, зв'язок між ними, про послідовність технологічних процесів, склад вихідної сировини, проміжних і кінцевих продуктів. Іноді технологічна схема

може мати відомості про габарити і конструкцію елементів. Технологічна схема дає більше уявлення про елементи, фізико-хімічні процеси, що протікають у них, ніж структурна, і може бути використана при розрахунках на стадії експлуатації і проектування системи. Вона являється невід'ємною частиною проекту.



Рис. 1.1. Функціональна схема ХТС виробництва карбаміду з повним рідинним рециклом

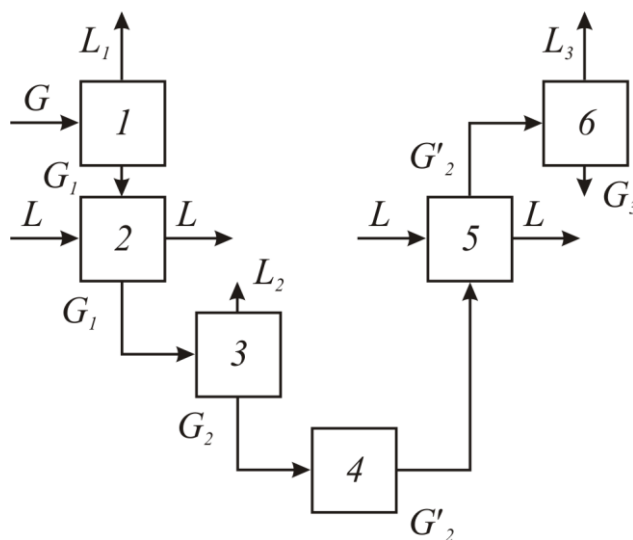


Рис. 1.2. Структурна схема підсистеми дистиляції I і II ступеня ХТС виробництва карбаміду з повним рідинним рециклом:
 1, 3, 6 – сепаратори; 2, 5 – підігрівники; 4 – дросельний вентиль; G, G_1, G'_2, G_2, G_3 – матеріальні рідинні потоки; L_1, L_2, L_3 – матеріальні газофазні потоки; L – енергетичний потік теплоносія

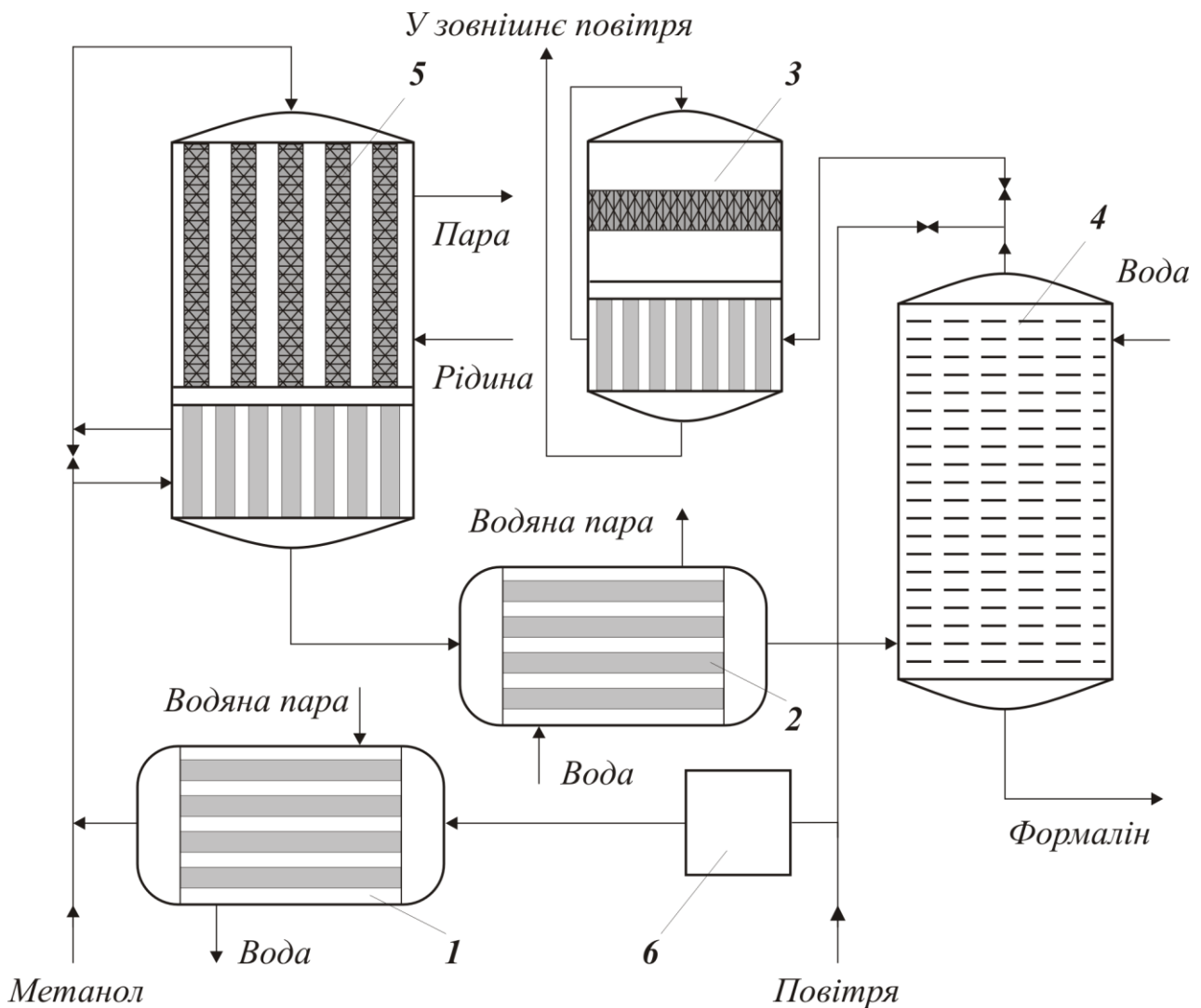


Рис. 1.3. Технологічна схема процесу окислювання метанолу:

1, 2 – теплообмінники; 3 – реактор каталітичного очищення; 4 – абсорбційна колона; 5 – реактор; 6 – газодувка

Операторна схема ХТС також складається з елементів і технологічних зв'язків між ними. Однак кожний елемент на ній зображений у вигляді умовного типового технологічного оператора. *Типовий технологічний оператор* відповідає типовому процесу хімічної технології. Він відображає перетворення вхідних технологічних потоків у вихідні матеріальні й енергетичні потоки. Розрізняють **основні** і **допоміжні** типи технологічних оператори. До *основного* відносять оператори хімічного перетворення, міжфазного масообміну, змішання і поділу (**рис. 1.4**). Основні технологічні оператори забезпечують функціонування ХТС у необхідному цільовому напрямку.

До *допоміжного* відносять технологічні оператори нагрівання або охолодження, стиску або поширення і зміни агрегатного стану речовини (**рис. 1.5**). Допоміжні технологічні змінюють енергетичний і фазовий стан технологічних потоків.

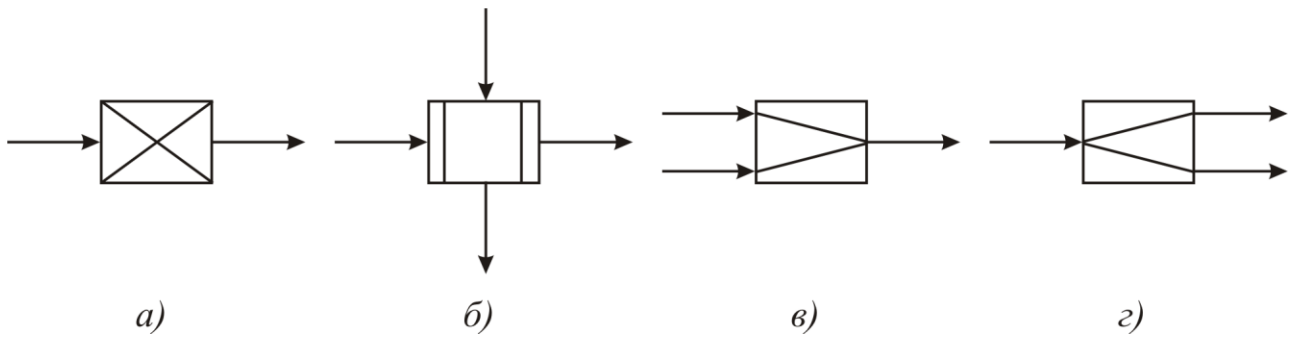


Рис. 1.4. Основні технологічні оператори ХТС:
а – хімічного перетворення; *б* – міжфазного обміну; *в* – змішання; *г* – поділу

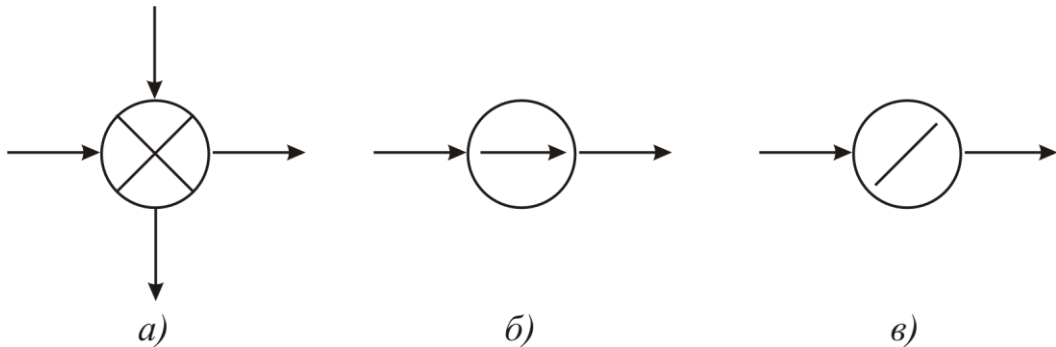


Рис. 1.5. Допоміжні технологічні оператори ХТС:
а – нагрівання або охолодження; *б* – стиску чи поширення; *в* – зміни агрегатного стану

Іноді на операторній схемі елемент ХТС представляють як сукупність кількох типових операторів. Наприклад, реактор, у якому відбувається екзотермічна хімічна реакція, можна представити у виді сукупності двох типових технологічних операторів — хімічного перетворення й охолодження.

Операторна схема містить не тільки інформацію про типи елементів, послідовність технологічних процесів, але і дає ясне уявлення про фізико-хімічну сутність технологічних процесів у системі (**рис. 1.6**).

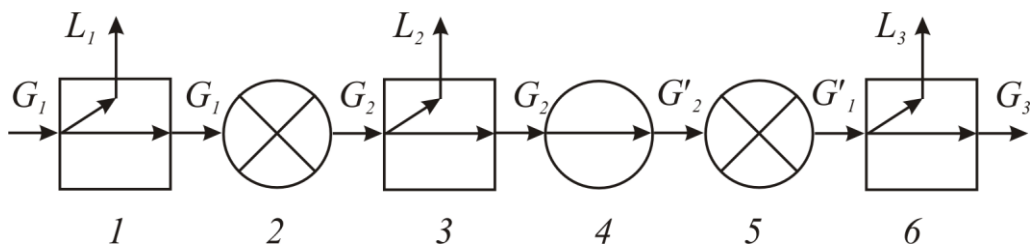


Рис. 1.6. Операторна схема підсистеми дистиляції I і II ступеня ХТС виробництва карбаміду:

1, 3, 6 – сепаратори; *2, 5* – підігрівники; *4* – дросельний вентиль

У теорії ХТС користуються операторною схемою, вона вводиться в ЕОМ у вигляді програмних або обчислювальних модулів, побудованих на базі математичних моделей окремих технологічних операторів. Такий модульний принцип лежить в основі створення систем автоматизованого проектування

хімічних підприємств (САПР). Однак операторна схема, як і раніше розглянуті, не містить кількісної інформації про функціонування системи.

Крім розглянутих образотворчих моделей загальне уявлення про функціонування ХТС дають і операційно-описові моделі, що представляють собою словесний послідовний опис різних хіміко-технологічних процесів, що відбуваються в елементах ХТС. Прикладом операційно-описових моделей є технологічні регламенти виробництва хімічних продуктів.

1.3. ОСНОВНІ ТИПИ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ЗВ'ЯЗКІВ

Взаємодія окремих елементів і підсистем ХТС здійснюється завдяки наявності між ними технологічних зв'язків. Описані вище графічні моделі ХТС дають перше уявлення про роль технологічних зв'язків у системах. До сказаного варто додати, що спосіб з'єднання технологічних елементів між собою істотно впливає на якість функціонування системи. Розглянемо основні типи технологічних зв'язків між технологічними операторами і підсистемами: послідовні, послідовно-обвідні (байпаси), паралельні, зворотні (рецикли), перехресні (*рис. 1.7*).

Послідовний технологічний зв'язок (рис. 1.7, а) між елементами системи характеризується тим, що вихідний з одного елемента потік являється вхідним для наступного елемента; при цьому всі технологічні потоки проходять через кожен елемент системи не більше одного разу. Послідовний технологічний зв'язок дозволяє підвищити ефективність функціонування даної групи технологічних елементів. Так, наприклад, у каскаді прямоточних хімічних реакторів ступінь перетворення вихідної сировини підвищується.

Послідовно-обвідний технологічний зв'язок (байпас) (рис. 1.7, б) характеризується тим, що при послідовному включенні елементів системи потік реагентів розподіляється між ними – частина вихідного потоку з одного елемента минає деякі елементи ХТС у послідовному ланцюзі апаратів, а потім знову поєднується з основним потоком. Послідовно-обвідний зв'язок найчастіше застосовується при адіабатичному проведенні екзотермічної реакції, оскільки дозволяє керувати процесом. Байпасування холодного технологічного потоку сировини обумовлює зниження температури потоку реагентів на виході з адіабатичного реактора і підвищення концентрації реагуючої речовини на вході в наступний реактор. При байпасуванні на вхід кожного хімічного реактора зменшується частка технологічного потоку, що приводить до збільшення часу перебування реагентів і виходу цільового продукту.

Паралельний технологічний зв'язок (рис. 1.7, в) застосовується для підвищення продуктивності і потужності ХТС, а також при рівнобіжному одержанні з одної вхідної речовини кількох проміжних продуктів, що використовуються у виробництві одного цільового продукту.

Зворотний технологічний зв'язок (рецикл) (рис. 1.7, г) характеризується наявністю зворотного технологічного потоку, що зв'язує вихід наступного

елемента з входом попереднього. При цьому елементи з'єднані між собою послідовно і разом зі зворотним технологічним потоком утворюють замкнуту підсистему ХТС.

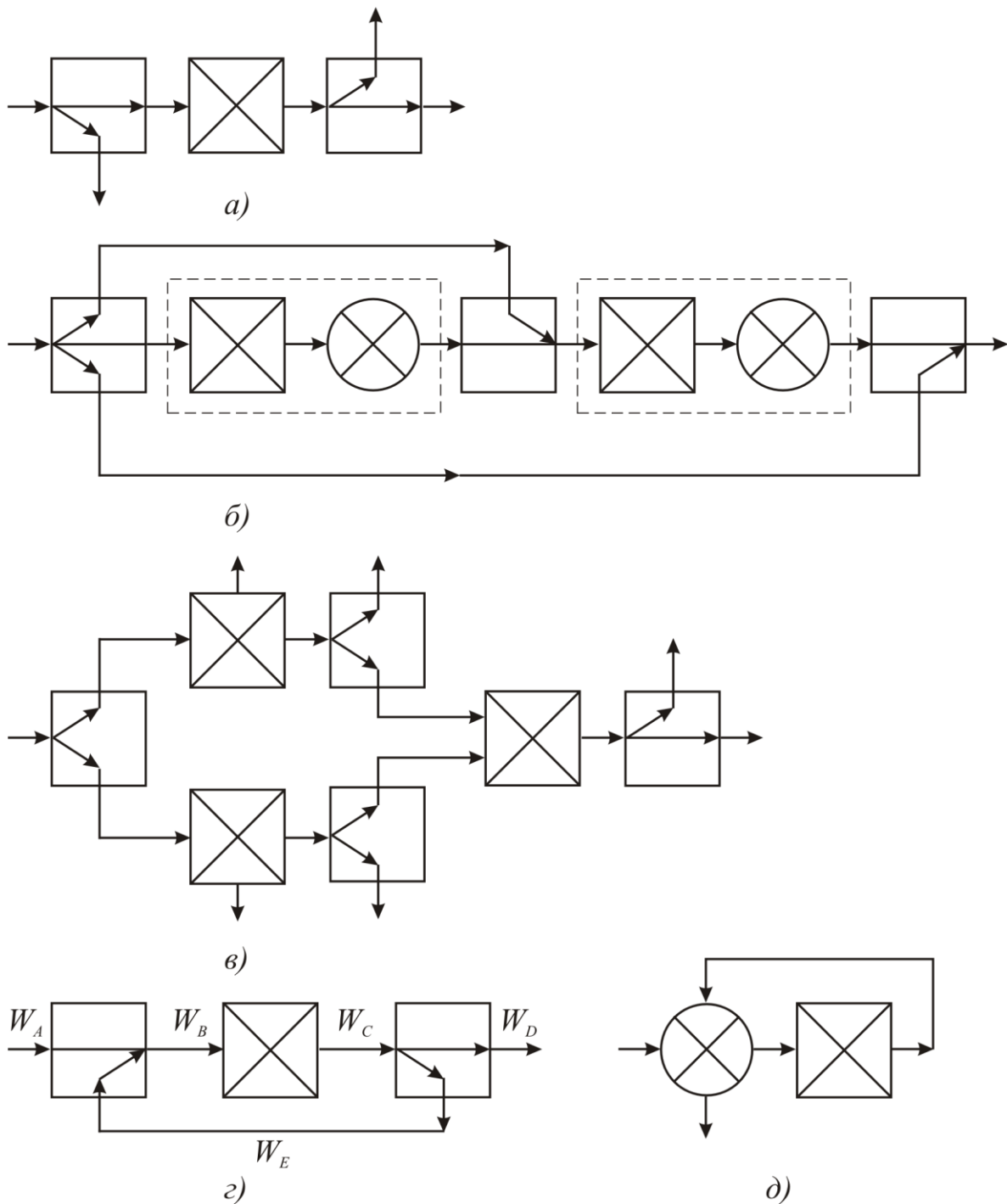


Рис. 1.7. Типи технологічних зв'язків між різними елементами технологічних операторів і підсистем ХТС:
а – послідовна; *б* – послідовно-обвідна (байпас); *в* – паралельна; *г* – зворотна (рецикл); *д* – перехресна

У системі зі зворотним технологічним зв'язком виділяють прямий (W_A , W_D), головний (W_B , W_C) і зворотний (W_E) технологічні потоки. На вході простої замкнутої ХТС до зворотного потоку додають вхідний прямий технологічний потік, у якому кількість свіжих вхідних компонентів дорівнює їхній витраті на одержання заданого продукту з урахуванням утрат. Прості замкнуті ХТС характеризуються *коефіцієнтом відносної рециркуляції*:

$$R = W_E/W_B = W_E/W_C,$$

або *коефіцієнтом рециркуляції*:

$$K_R = W_B/W_A = W_C/W_D.$$

Між цими коефіцієнтами існує зв'язок:

$$R = 1 - 1/K_R ; K_R = 1/(1-R).$$

Рецикл відіграє значну роль у техніці. У ХТС зі зворотним технологічним зв'язком досягається більш повне перетворення сировини і регенерація енергії за рахунок використання теплоти реакції, створюються сприятливі технологічні режими – забезпечення надлишку одного з реагентів, підтримка бажаного температурного режиму, придушення побічних реакцій і т.п. Зворотний технологічний зв'язок доцільно застосовувати в тих випадках, коли за один цикл у хімічному реакторі досягається низький ступінь перетворення. Після відділення продукту від сировини, що не прореагувала, останню повертають у реактор. Приклади ХТС із рециклом: синтез аміаку, синтез метанолу з оксиду вуглецю і водню, етанолу з етилену гідратацією в паровій фазі й ін.

Перехресний технологічний зв'язок (рис. 1.7, д) застосовують з метою більш ефективного використання енергії ХТС. Теплоту продуктів чи реакції газів, що відходять, використовують для підігріву вихідної сировини. Якщо в системі протікають процеси під високим тиском, перехресний зв'язок дає можливість використовувати енергію стиснутих газів чи рідин. Сучасні могутні хімічні агрегати в сполученні з перехресним зв'язком дозволяють створити замкнуті по енергії системи. Використовуючи розглянуті типові технологічні зв'язки між елементами і підсистемами, можна створити будь-яку ХТС.

Технологічна структура ХТС складається з деякого числа елементів певного типу при різній комбінації типових технологічних зв'язків. З погляду особливостей технологічної структури розрізняють системи **розімкнуті** і **замкнуті**.

Технологічна структура розімкнутих ХТС забезпечує проходження всіх технологічних потоків через будь-який елемент системи лише один раз. Її утворюють комбінацією послідовних, рівнобіжних і послідовно-обвідних технологічних зв'язків між елементами.

Технологічна структура замкнутих ХТС містить, принаймні, один зворотний технологічний зв'язок. Замкнута система вважається простою, якщо при обході контуру, утвореного головним і зворотнім технологічними потоками, жоден елемент системи не повторюється двічі. Сукупність кількох

взаємозалежних замкнутих підсистем, що включають хоча б один загальний елемент або один загальний технологічний потік, утворює замкнуту багатоконтурну ХТС.

Для досягнення однієї і тієї ж мети функціонування системи можна використовувати різні типи технологічних зв'язків. Як приклад розглянемо два типи технологічної структури ХТС ізомеризації н-бутану (рис. 1.8).

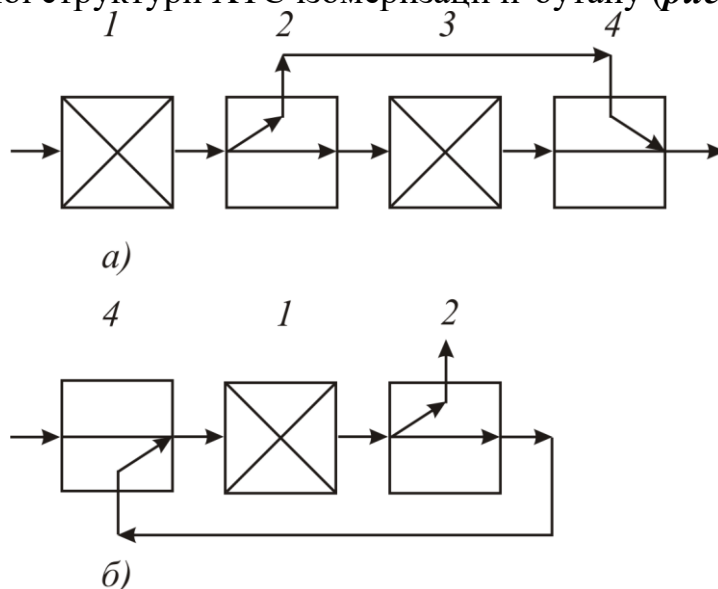


Рис. 1.8. Операторні схеми ХТС ізомеризації н-бутану з послідовно-обвідним (а) і зі зворотним (б) технологічними зв'язками:

1, 3 – каталітичні реактори; 2 – ректифікаційна колона; 4 – змішувач

У ХТС із послідовно-обвідним технологічним зв'язком (рис. 1.8, а) н-бутан надходить у каталітичний реактор 1, де ізомеризується до певного ступеня перетворення. Продукти хімічної реакції надходять у ректифікаційну колону 2, у якій розділяються на верхній продукт, що складається з ізобутану необхідної чистоти, і нижній – н-бутан, що далі ізомеризується в реакторі 3. Продукт ізомеризації, що надходить з реактора 3, змішується з верхнім продуктом у змішувачі 4 і виходить з нього у вигляді готового продукту.

Ізомеризацію н-бутану можна здійснити також у ХТС зі зворотним технологічним зв'язком (рис. 1.8, б). Технологічний потік н-бутану надходить у змішувач 4, змішується з нижнім продуктом з колони 2 і направляється в реактор 1, де ізомеризується до певного ступеня перетворення. Продукти ізомеризації з реактора 1 подаються в колону 2, де відбувається поділ на готову продукцію (верхній продукт) і рециркуляційну суміш (нижній продукт).

Порівняння розглянутих технологічних структур ХТС показує, що в першому випадку для досягнення заданої ефективності використання сировини необхідна більша кількість устаткування і відповідно виробничі площі, ніж при використанні технологічної структури з рециклом. Однак у ХТС зі зворотним технологічним зв'язком накопичуються баластові домішки. Звичайно розімкнуті ХТС застосовуються у виробництвах, що включають необоротні чи оборотні процеси, що йдуть з великим виходом продукту. Замкнуту ХТС використовують у тому випадку, коли вихід продукту в одному апараті складає

4-5% (синтез спиртів) або до 20% (синтез аміаку) і реагуюча суміш містить незначну кількість домішок. Приведені приклади переконують в тому, що вибір структури являється важливим етапом при створенні нових виробництв.

1.4. ЗАГАЛЬНА ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ АНАЛІЗУ, СИНТЕЗУ І ОПТИМІЗАЦІЇ ХТС

Розглянемо загальну постановку задач аналізу, синтезу і оптимізації ХТС, що виникають при розрахунках проєктованих і функціонуючих хімічних виробництв.

Аналіз функціонування ХТС складається з вивчення властивостей і поведінки системи в залежності від її структури і значень як параметрів системи, так і параметрів технологічних режимів її елементів.

При рішенні задач аналізу структура системи і значення всіх її конструктивних і технологічних параметрів вважаються відомими. Потрібно обчислити значення функціональних характеристик системи (наприклад, показник ефективності) для фіксованого набору початкових станів. На практиці аналіз найчастіше зводиться до того, що для кожного з варіантів ХТС обчислюють показник ефективності функціонування системи. Зіставлення цих показників дає уявлення про переваги і недоліки тих чи інших варіантів системи. При цьому на стадії проєктування з'являється можливість відразу закладати в проєкт оптимальні науково обґрунтовані рішення, на стадії експлуатації досягається інтенсифікація виробництва.

В останні роки при рішенні задачі аналізу досягнуті певні успіхи завдяки застосуванню методу математичного моделювання хіміко-технологічних процесів. Цей метод дозволяє з достатнім ступенем точності прогнозувати властивості окремих процесів і систем заданої структури в широкому діапазоні зміни умов їхньої роботи. Побудова математичних моделей починається зі складання формалізованого опису процесів, що відбуваються в об'єкті моделювання на нижніх рівнях системи. Наступне об'єднання цих моделей у єдину систему рівнянь з використанням загальних співвідношень матеріальних і енергетичних балансів дозволяє одержати математичну модель окремих елементів і ХТС у цілому. Наявність математичної моделі будь-якого ступеня складності, що визначається точністю опису основних закономірностей, ще не дозволяє визначити основні характеристики об'єкта. Для рішення систем рівнянь математичної моделі необхідна розробка алгоритму, що володіє достатньою швидкістю і забезпечує можливість розрахункового дослідження процесу в широкому діапазоні зміни його режимних параметрів. Алгоритм аналізу ХТС установлює порядок розрахунку математичних моделей елементів системи для визначення характеристик її вихідних потоків при заданих значеннях перемінних вхідних потоків. Для розробки оптимального алгоритму аналізу ХТС із послідовними, рівнобіжними, перехресними і зворотними технологічними зв'язками між елементами необхідно здійснити декомпозицію системи на строго супідпорядковані складові з наступним розрахунком кожної з отриманих підсистем. Основним методом оцінки функціонування підсистеми

є теорія оптимізації. Оптимальна поведінка підсистеми повинна забезпечувати найкраще виконання даної функції системи в цілому. Сама підсистема при цьому може функціонувати не найкращим чином.

Розробка оптимального алгоритму аналізу ХТС обумовлюється технологічною структурою системи. Для розімкнутих ХТС алгоритм аналізу складається в послідовному розрахунку рівнянь математичних моделей елементів у порядку їхнього розташування уздовж технологічного потоку з використанням розрахованих значень параметрів вихідних потоків попередніх елементів як відомі значення параметрів вхідних потоків наступних елементів. Один з методів розрахунку замкнутих багатоконтурних систем складається в перетворенні замкнутої системи в еквівалентну розімкнуту систему. Це так званий метод розриву зворотних технологічних зв'язків.

Необхідність застосування методу послідовного розрахунку рівнянь математичних моделей елементів розімкнутих ХТС і методу розрахунку багатоконтурних ХТС перетворенням їх в еквівалентні розімкнуті системи обумовлена багатомірністю математичних моделей сучасних ХТС. Як правило, рішення систем таких рівнянь здійснюється чисельними методами з використанням обчислювальної техніки.

Синтез ХТС складається у виборі типів елементів, структури технологічних зв'язків між ними, а також у визначенні параметрів елементів і технологічних потоків системи, що забезпечують оптимальне значення показника ефективності функціонування ХТС.

При рішенні задач синтезу передбачаються заданими необхідні значення функціональних характеристик системи (наприклад, показник ефективності). Потрібно вибрати в залежності від конкретних умов структуру системи, тип елементів, їхні параметри і параметри технологічних потоків системи, що забезпечували б виконання визначеної мети функціонування і потрібний оптимум показника ефективності функціонування системи. Як правило, задача синтезу ставиться як екстремальна задача. Синтез оптимальної технологічної системи припускає прямий пошук оптимальної її структури в області всіх можливих варіантів структур з пошуком оптимальних параметрів системи в межах кожної можливої структури. Однак у даний час строго формально вирішувати задачі синтезу надзвичайно важко. Тому на практиці використовують різні неформальні прийоми синтезу систем. Власне кажучи, усі вони зводяться до так званого перебору варіантів або «синтезу через аналіз». Суть його полягає в тому, що, приступаючи до синтезу системи, дослідник намічає деякий початковий варіант системи (її структуру і значення параметрів). Цей варіант відомими методами аналізу піддається всебічному дослідженню. Результати аналізу початкового варіанта системи порівнюються з заданими значеннями показників, що бажано одержати при синтезі. Як правило, початковий варіант не є цілком задовільним у тому сенсі, що між заданими й отриманими значеннями функціональних характеристик є істотна різниця. Тоді може бути намічений інший варіант системи з урахуванням

досвіду вибору початкового і так доти, поки не будуть отримані задані значення функціональних характеристик.

В даний час досягнуті певні успіхи в розробці методів рішення задач синтезу ХТС, у яких продукти утворюються з використанням простих хімічних реакцій, а також задач синтезу теплообмінних і ректифікаційних систем. Ведуться широкі дослідження по створенню принципів і методів автоматизованого синтезу високоефективних ХТС, де продукти одержують за складними реакціями.

Задача *оптимізації* ХТС є комплексною. Вона містить у собі як оптимізацію структури, так і оптимізацію режимів функціонування елементів. Ціль оптимізації – забезпечення найбільш високих техніко-економічних показників ХТС.

Слід зазначити зв'язок, що існує між задачами оптимізації, синтезу й аналізу. Дійсно, при створенні нового виробництва виконується синтез кількох альтернативних варіантів ХТС, аналізуються їхні техніко-економічні показники, відбувається пошук остаточного оптимального варіанта.

Процес розробки технологічної структури ХТС являє собою творчу операцію, що не може бути цілком формалізована й алгоритмізована при рішенні задач синтезу. І все ж таки можна виділити деякі основні етапи, на яких розв'язуються конкретні завдання синтезу й аналізу можливого альтернативного варіанта проектованої ХТС.

1. Визначити маршрут хімічного синтезу молекул заданого цільового продукту з урахуванням сировини і відомих хімічних реакцій.
2. Побудувати функціональну схему.
3. Вибрати тип елементів ХТС відповідно до заданої мети функціонування системи.
4. Вибрати типи технологічних зв'язків, що дозволяють розробити структуру ХТС, яка задовольняє необхідній цілі функціонування; побудувати структурну чи технологічну схему.
5. Скласти математичні моделі елементів ХТС.
6. Погодити параметри матеріальних і енергетичних потоків і визначити матеріально-теплові навантаження на елементи ХТС рішенням матеріально-теплових балансів.
7. Визначити параметри елементів і технологічних потоків, що забезпечують виконання необхідної мети функціонування ХТС при оптимальному значенні показника ефективності функціонування ХТС.
8. Здійснити корекцію технологічної структури, змінити параметри елементів і параметри технологічних потоків з метою забезпечення необхідної мети функціонування при оптимальному значенні показника ефективності функціонування ХТС.

Якість пророблення всіх етапів синтезу ХТС повинна бути такою, щоб система задовольняла пропонованим вимогам техніко-економічного і соціального характеру. Серед цих вимог слід зазначити:

- 1) одержання продукту необхідної якості економічно доцільним методом;
- 2) екологічна безпека;
- 3) пожежнотехнічна безпека;
- 4) нешкідливість і надійність при експлуатації.

Щоб синтезована ХТС задовольняла цим вимогам, необхідно при рішенні конкретних задач синтезу виходити з визначених концепцій, до яких відносяться:

- 1) глибока переробка сировини;
- 2) повне використання сировинних ресурсів;
- 3) мінімізація теплових і енергетичних витрат;
- 4) мінімізація відходів виробництва;
- 5) оптимальне використання апаратури.

Глибокої переробки сировини можна досягти:

- 1) вибором процесу в залежності від виду сировини (небагатостадійний хімічний процес доцільніший за багатостадійний);
- 2) застосуванням надлишку одного з реагентів;
- 3) організацією протилежного контакту фаз для гетерогенних процесів;
- 4) організацією рециркуляції.

Повноти переробки сировини досягають:

- 1) вибором умов процесу, що забезпечують найбільшу селективність;
- 2) регенерацією матеріалів;
- 3) використанням відходів у якості основних або допоміжних матеріалів при випуску продукції (вторинні матеріальні ресурси);
- 4) з'єднанням виробництв.

Мінімізації теплових і енергетичних витрат досягають:

- 1) регенерацією теплоти (використання теплоти продуктів, що відходять, для підігріву сировини);
- 2) використанням теплоти продуктів, що відходять, для виробництва пари (вторинні енергетичні ресурси);
- 3) регенерацією енергії (використання енергії газових і рідинних потоків, що знаходяться під високим тиском).

Системи, що працюють без підведення теплоти й енергії ззовні, одержали назву *енерготехнологічних*. Це дуже складні системи по потоках і апаратах з великим числом зворотних зв'язків. Енерготехнологічні системи дозволяють максимально використовувати енергетичний потенціал сировини. Як приклад можна назвати виробництво аміаку, розведеної азотної кислоти.

Проблема мінімізації відходів тісно зв'язана з питаннями екології і санітарних норм праці. Відходи бувають технологічні, енергетичні і допоміжні (вода, повітря). Зведення до мінімуму кількості усіх видів відходів у сполученні з їхньою переробкою у вторинні матеріальні ресурси дозволяє організувати безвідходне виробництво. Створення безвідходної технології досягається:

- 1) збільшенням повноти і глибини переробки сировини;
- 2) утилізацією теплоти;

- 3) регенерацією теплоти й енергії;
- 4) створенням замкнутих циклів водопостачання;
- 5) зменшенням кількості допоміжних потоків, що є джерелами забруднень.

Оптимальне використання апаратури – це зменшення витрат на устаткування в перерахуванні на одиницю продукції, що випускається. Дана проблема вирішується:

- 1) інтенсифікацією процесів, що приводить до зменшення робочого об'єму апарата (оптимізація технологічних режимів, зменшення дифузійних і теплових опорів);
- 2) більш раціональною організацією проведення процесу (використання насадочних колон замість барботажних, здійснення процесу в зваженому шарі каталізатора);
- 3) удосконалюванням конструкції;
- 4) збільшенням одиничної потужності апарата.

Звичайно при побудові ХТС прагнуть максимально з'єднати різні технологічні прийоми, що забезпечують оптимальне функціонування системи.

1.5. КЛАСИФІКАЦІЯ ЗМІННИХ ВЕЛИЧИН, ЩО ХАРАКТЕРИЗУЮТЬ РОБОТУ ХТС

Розглянемо ХТС, представлену на (рис. 1.9.) Величини

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

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

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

являють собою вектори вхідних, вихідних змінних і управлінь k -го елемента ХТС.

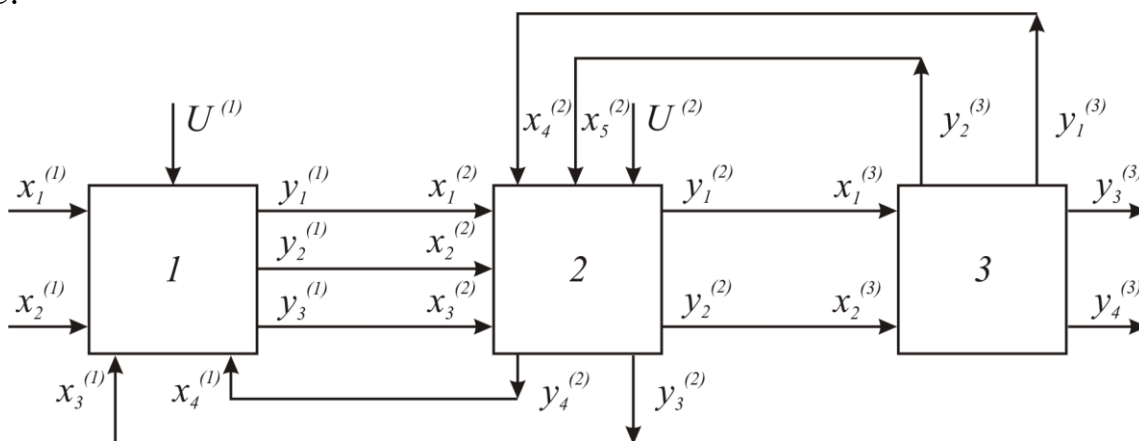


Рис. 1.9. Класифікація змінних величин, що характеризують роботу ХТС

Вхідні змінні елементів ХТС, що не являються вихідними змінними інших елементів, будемо називати вхідними змінними даної ХТС (змінні

$x_1^{(1)}, x_2^{(1)}$ на *рис. 1.9*), вихідні змінні елементів ХТС, що не являються вхідними змінними ніяких інших елементів – вихідними змінними ХТС (змінні $y_3^{(3)}, y_4^{(3)}$ на *рис. 1.9*), а усі інші – проміжними змінними.

Потоки ХТС можливо характеризувати векторними величинами, що вказують витрату, температуру, тиск і склад середовища. У цьому випадку зв'язки між елементами на схемі вказуються однією лінією. Скалярна величина, що чисельно дорівнює кількості параметрів стану потоків, називається **параметричністю**.

Зв'язки між елементами ХТС задаються співвідношеннями

$$x_i^{(k)} = y_j^{(h)}, \quad (1.2)$$

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

Наприклад, структуру розглянутої ХТС задають наступні рівняння:

$$\begin{aligned} x_1^{(2)} = y_1^{(1)}; x_2^{(2)} = y_2^{(1)}; x_3^{(2)} = y_3^{(1)}; x_4^{(2)} = y_1^{(3)}; x_5^{(2)} = y_2^{(3)}; \\ x_3^{(1)} = y_3^{(2)}; x_4^{(1)} = y_4^{(2)}; x_1^{(3)} = y_1^{(2)}; x_2^{(3)} = y_2^{(2)}. \end{aligned} \quad (1.3)$$

Математичні описи елементів ХТС мають вигляд

$$y_i^{(k)} = f_i^{(k)}(x_1^{(k)}, \dots, x_m^{(k)}, u_1^{(k)}, u_2^{(k)}, \dots, u_r^{(k)}), \quad (1.4)$$

де $i = 1, 2, \dots, n$;

$k = 1, 2, \dots, N$;

N – число елементів у системі;

n – параметричність потоку.

Система рівнянь технологічних зв'язків елементів ХТС (1.3) разом з математичними описами окремих елементів системи (1.4) являє собою математичну модель ХТС. Усі змінні, що входять в рівняння (1.3) і (1.4), називаються **інформаційними**. Інформаційні змінні підрозділяють на проектні (що задані) і розрахункові (що шукають). Серед проектних змінних виділяють **регламентовані й оптимізуючі** змінні ХТС.

До **регламентованих** змінних відносять **технологічні параметри** (параметри стану потоків: витрата; тиск; температура; склад; активність каталізатора; щільність зрошення в абсорбері; флегмове число в ректифікаційній колоні та ін.) і **конструкційні параметри** елементів (конструкційний тип апаратів, їхні розміри, кількість). **Регламентовані** змінні знаходяться за даними проектного завдання.

Змінні, значення яких можна варіювати при заданих значеннях регламентованих змінних з метою перебування оптимального режиму роботи ХТС, називають **оптимізуючими**.

Необхідно відзначити, що в якості вільних (незалежних змінних) із усіх інформаційних можуть бути обрані тільки проектні змінні ХТС.

Різниця між числом інформаційних змінних і числом інформаційних зв'язків чи умов, що існують між змінними, називається **числом ступенів**

свободи ХТС. Воно являє собою число вільних змінних, які можна змінювати при оптимізації ХТС.

1.6. ВЛАСТИВОСТІ ХТС

ХТС мають сукупність властивостей, які необхідно враховувати при проектуванні нового чи реконструкції діючого виробництва. Розглянемо деякі основні властивості ХТС.

Чутливість ХТС до зовнішніх і внутрішніх збуджувань (впливів) – це здатність системи реагувати на них, тобто змінювати параметри стану. Бажано, щоб система була малочутливою до збуджувань.

Керованість ХТС – це властивість системи досягати мети управління. Звичайно ціль управління – випуск заданої кількості продукції необхідної якості. Для забезпечення необхідної керованості необхідно здійснювати спільне проектування ХТС і відповідної системи управління.

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

Перешкодозахищеність – це властивість ХТС ефективно протистояти внутрішнім і зовнішнім збурюванням.

Стійкість – це здатність ХТС повертатися у вихідне стаціонарне (стале) становище після усунення збуджувань, що викликали вихід системи з цього становища.

Така властивість ХТС, як **складність**, обумовлюється складністю процесів, що протікають у ній, числом вхідних у її сполуку елементів, числом і видами зв'язків між елементами і т.д.

Завдяки об'єднанню елементів у систему, вона здобуває нові якості, якими не володіють елементи окремо. Ця властивість системи називається **емерджентністю**. Зокрема, ХТС забезпечує випуск товарної продукції, у той час як жоден з її елементів, узятий окремо, не може виконати цього завдання.

Елементи, що утворюють ХТС, взаємозалежні і, завдяки цьому, впливають один на одного. Цей взаємовплив обумовлює властивість системи, названу **інтеректністю**.

Усі перераховані властивості варто враховувати при розробці систем автоматизованого проектування ХТС.

1.7. ПРИКЛАДИ ЗАДАЧ

1.7.1. Розрахунок оптимального числа реакторів у каскаді РІЗ

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

З використанням моделюючої програми розрахувати число реакторів однакового обсягу, необхідних для досягнення кінцевого ступеня перетворення вихідного реагенту при протіканні реакції типу $A \rightarrow R$ довільного порядку n та знайти оптимальне число реакторів у каскаді по мінімуму капітальних витрат.

ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

У каскаді послідовно з'єднаних m реакторів (рис. 1.10), обладнаних мішалками, що забезпечують інтенсивне перемішування, протікає реакція, кінетика якої описується наступним рівнянням

$$W = k \cdot C_A^n. \quad (1.5)$$

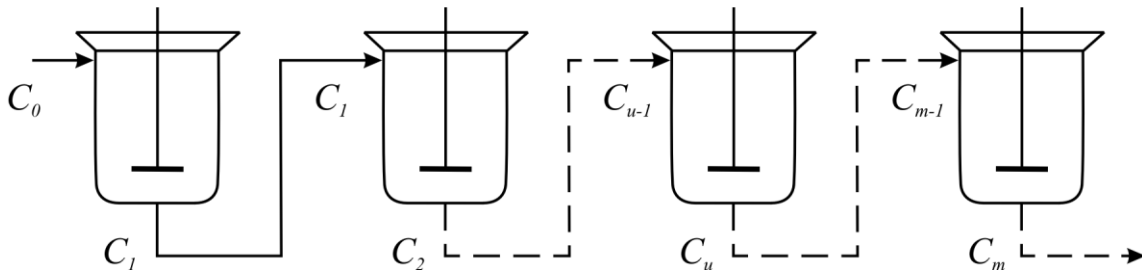


Рис. 1.10. Схема каскаду реакторів

Математичний опис каскаду РІЗ відповідно до постановки задачі при $T, V = \text{const}$ зводиться до системи рівнянь матеріальних балансів по реагенту A для всіх реакторів каскаду:

$$\frac{V}{V_u} (C_{A,u-1} - C_{A,u}) = \frac{1}{\tau_u} (C_{A,u-1} - C_{A,u}) = W(C_{A,u}) = k(T) \cdot C_{A,u}^n; \quad u = 1 \dots m, \quad (1.6)$$

де V – об'ємна витрата, $\text{м}^3/\text{с}$; V_u – об'єм u -го реактора; τ_u – час перебування в u -му реакторі; $C_{A,u-1}$, $C_{A,u}$ – концентрація компонента A на вході і виході u -го реактора.

Більш зручна для обчислень структура математичного опису (1.6) може бути отримана введенням нової змінної – відносної характеристики визначальної частки реагенту A , що не прореагував в u -му реакторі ($0 < v_u < 1$).

$$v_u = \frac{C_{A,u}}{C_{A,u-1}}. \quad (1.7)$$

Частка реагенту, що не прореагував в каскаді з m реакторів, обумовлена добутком

$$v_k = \frac{C_{A_m}}{C_{A_n}} = \prod_{u=1}^m v_u,$$

зв'язана зі ступенем перетворення реагенту А в каскаді очевидним співвідношенням

$$X_{A_k} = 1 - v_k = 1 - \prod_{u=1}^m v_u. \quad (1.8)$$

Для введення змінної v_u у математичний опис каскаду РІЗ систему (1.6) розділимо почленно на $C_{A,u-1}$

$$1 - \frac{C_{A,u}}{C_{A,u-1}} = k(T) \cdot \tau_u \frac{C_{A,u}^n}{C_{A,u-1}} = k(T) \cdot \tau_u \cdot C_{A,u-1}^{n-1} \left[\frac{C_{A,u}}{C_{A,u-1}} \right]^n; \quad u = 1, \dots, m$$

Виділимо постійну для u -го реактора

$$R_u = k(T) \cdot \tau_u \cdot C_{A,u-1}^{n-1}; \quad u = 1, \dots, m. \quad (1.9)$$

з урахуванням (1.9) і (1.7) одержимо з (1.8) нову, більш просту систему

$$1 - v_u = R_u \cdot v_u^n; \quad u = 1, \dots, m. \quad (1.10)$$

Тепер математичний опис каскаду РІЗ при проведенні реакції типу $A \rightarrow R$ n -го порядку являє собою систему алгебраїчних рівнянь виду

$$f(v_u) = R_u \cdot v_u^n + v_u - 1 = 0; \quad u = 1, \dots, m, \quad (1.11)$$

рішення якої зводиться до визначення кореня v_u функції $f(v_u)$ для кожного реактора каскаду. Точне аналітичне рішення (1.11) можливо лише у випадках цілочислових значень $n = 0, 1, 2, 3$.

При нецілочислових значеннях n , типових для формальних кінетичних рівнянь, рішення рівнянь (1.11) вимагає застосування наближених чисельних методів. Для визначення кореня v_u функції $f(v_u)$ використовуємо ітераційний метод Ньютона. При досить добре відомому початковому наближенні v_u , яке може бути прийнято рівним 1 (відсутність хімічного перетворення), подальший пошук рішення v_u здійснюється методом послідовних наближень (ітерацій), обумовлених формулою Ньютона:

$$(v_u)_{i+1} = (v_u)_i - \frac{f(v_u)_i}{f'(v_u)_i}, \quad (1.12)$$

де i – номер ітерації.

Для рішення рівнянь системи (1.11) формула (1.12) приймає конкретний вид

$$(v_u)_{i+1} = (v_u)_i - \frac{R_u \cdot (v_u)_i^n + (v_u)_i - 1}{n \cdot R_u \cdot (v_u)_i^{n-1} + 1}. \quad (1.13)$$

При добрій збіжності методу умовою закінчення пошуку кореня v_u , тобто умовою закінчення розрахунку u -го реактора, є виконання нерівності:

$$\left| (v_u)_{i+1} - (v_u)_i \right| = \frac{f(v_u)_i}{f'(v_u)_i} \leq 0,001. \quad (1.14)$$

Умова закінчення розрахунку числа РІЗ у каскаді – ступінь перетворення реагенту А на виході X_{A_k} більш заданої X_A^3 , тобто:

$$X_{A_k} > X_A^3. \quad (1.15)$$

ОПИС ПРОГРАМИ

Для розрахунку числа реакторів ідеального змішання в каскаді, що забезпечує досягнення заданого ступеня перетворення при проведенні реакції типу $A \rightarrow R$ довільного порядку n ; використовується програма «RISKAS», блок-схема якої представлена на *рис. 1.11*.

У програмі прийняті наступні позначення:

J – номер реактора в каскаді;

I – номер ітерації;

ITMAX – задане максимальне число ітерацій;

N – порядок реакції n ;

KT – константа швидкості реакції n -го порядку при температурі T;

CAO – концентрація реагенту А у вхідному потоці;

VR – об'єм одного реактора V_u , м³;

VL – об'ємна витрата потоку V_o , м³/год.;

XK – заданий ступінь перетворення реагенту в каскаді $X_{A_k}^3$;

TAU – час перебування в реакторі J, хв;

CA(J) – концентрація реагенту А на виході з J-го реактора і на вході в (J+1)-й реактор;

XAK(J) – ступінь перетворення реагенту А, що досягається в каскаді з J реакторів;

V(J) – значення змінної v у J-му реакторі;

PV(J) – добуток змінних v у каскаді з J реакторів;

R(J) – постійна R для J-го реактора;

F, DF, S – відповідно функція $f(v_u)$, її похідна $f'(v_u)$ і їхнє відношення $f(v_u)/f'(v_u)$ у формулі (1.12)

Лістинг програми «RISKAS» наведений у додатку 1.

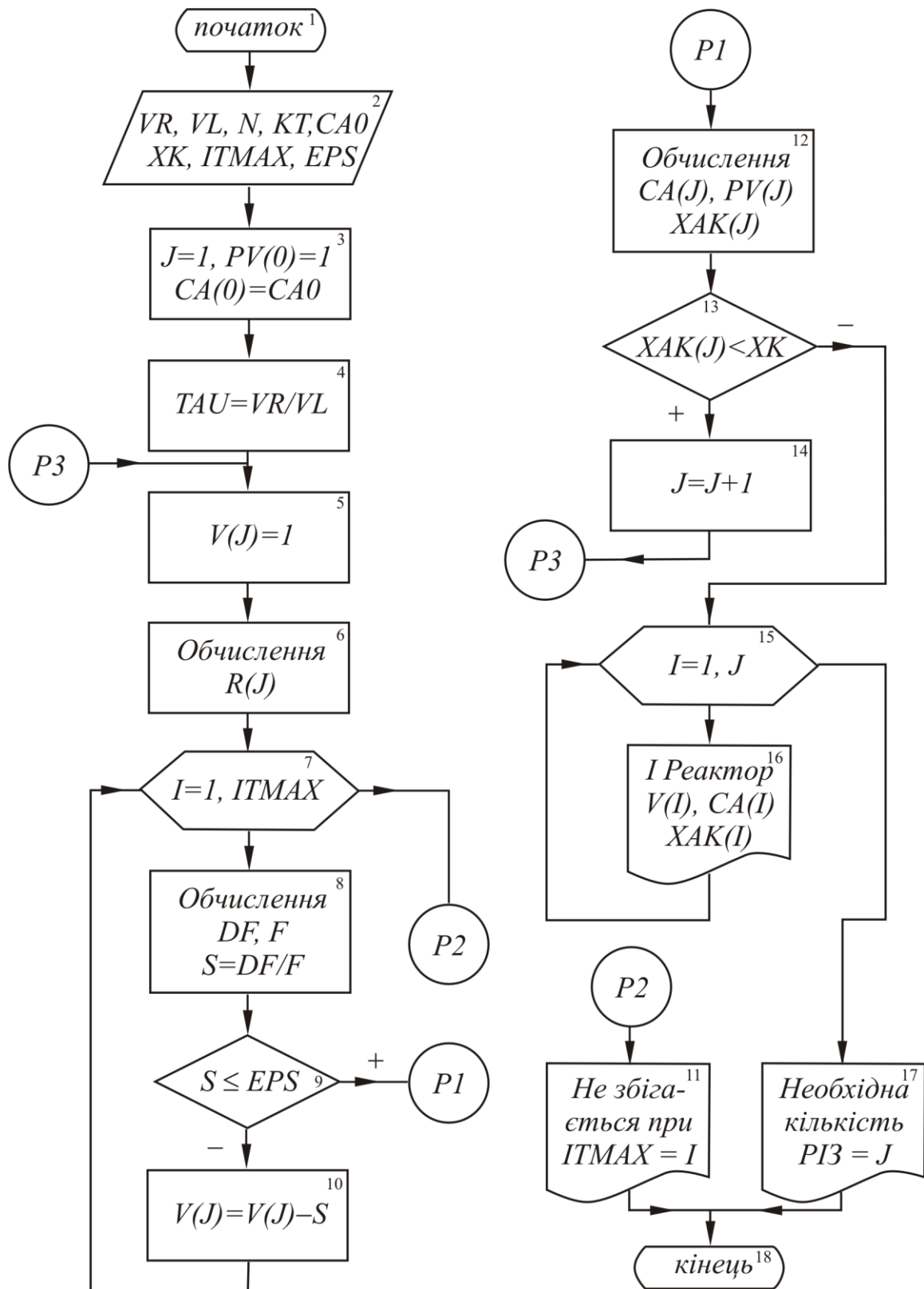


Рис. 1.11. Блок-схема розрахунку каскаду реакторів ідеального змішання за програмою «RISKAS»

Позначення в блок-схемі:

1 – початок; 2 – введення висхідних даних; 3 – присвоєння початкових значень J , $CA(0)$, $PV(0)$; 4 – обчислення TAU ; 5-12 – цикл розрахунку кожного реактора каскаду з використанням методу Ньютона; 5-6 – завдання початкового наближення змінної $V(J)$ і обчислення постійної реактора $R(J)$; 7-10 – ітераційний цикл пошуку кореня рівняння (1.7) $V(J)$ с заданою точністю S ; 11 – печатка повідомлення про відсутність збіжності; 12 – обчислення показників функціонування реактора при досягненні збіжності; 13-14 – перевірка досягнення заданого кінцевого ступеня перетворення й у разі потреби перехід до розрахунку наступного реактора; 15-17 – печатка результатів розрахунку; 18 – закінчення програми.

РОЗРАХУНОК ВАРТОСТІ КАСКАДУ РЕАКТОРІВ

Виходячи з заданої об'ємної витрати VL і обраного значення τ_i , визначається обсяг одного реактора VR_i :

$$VR_i = VL \cdot \tau_i. \quad (1.16)$$

Враховуючи знайдене значення числа реакторів N , розраховується об'єм усього каскаду VR

$$VR = m \cdot VR_i. \quad (1.17)$$

Вартість реакторів (Z_1) у першому наближенні можна прийняти пропорційно їх об'єму

$$Z_1 = VR \cdot B_1, \quad (1.18)$$

де B_1 – вартість одиниці об'єму реактора.

Вартість B_2 гідравлічних ліній, арматури, приладів і засобів автоматизації, що приходяться на один реактор, не залежать від його об'єму. Ці витрати для всього каскаду складають

$$Z_2 = m \cdot B_2. \quad (1.19)$$

Сумарна величина капітальних витрат складе

$$Z = Z_1 + Z_2 = VR \cdot B_1 + m \cdot B_2, \quad (1.20)$$

Знайшовши сумарні величини капітальних витрат для різного числа реакторів і побудувавши графік залежності $Z=f(m)$, визначається оптимальне число реакторів у каскаді за умовою мінімуму капітальних витрат.

НАВЧАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

1. Для заданого набору початкових даних (*табл. 1.1*) виконати необхідні розрахунки і визначити необхідне число реакторів N для досягнення заданого ступеня перетворення. Розрахунки провести для 7–10 значень часу перебування τ із вказаного діапазону.
2. За отриманими даним побудувати графік $N=f(\tau)$.

3. Для розрахованих значень N визначити сумарний обсяг каскаду і величину сумарних капітальних витрат.
4. Побудувавши графік залежності $Z = f(N)$, визначити оптимальне число реакторів у каскаді за умовою мінімуму капітальних витрат.
5. Для знайденого оптимального варіанта побудувати графік зміни ступеня перетворення X_i через усі реактори каскаду $X_i = f(i)$.

Таблиця 1.1

Початкові дані

№	CAO	KT	TAU, хв.	n	VL, м ³ /год.	B ₁ , грн./м ³	B ₂ , грн.
1	1,20	1,60	0,15 – 1,00	0,75	40	2400	140
2	1,30	1,50	0,15 – 0,80	0,72	60	1800	200
3	1,40	1,60	0,20 – 1,00	0,80	45	1900	180
4	1,50	1,40	0,15 – 1,00	0,75	65	2200	250
5	1,60	1,30	0,20 – 1,20	0,77	42	2000	400
6	1,70	1,50	0,20 – 0,90	0,73	50	1700	350
7	1,80	1,30	0,20 – 1,10	0,82	55	1500	150
8	1,50	1,60	0,10 – 0,90	0,74	68	2300	160
9	1,70	1,30	0,20 – 1,15	0,78	47	1600	170
10	1,90	1,40	0,20 – 1,20	0,85	62	1400	300
11	1,25	1,55	0,15 – 1,20	0,81	53	1300	240
12	1,38	1,42	0,15 – 1,00	0,76	59	2100	130
13	1,46	1,63	0,15 – 1,20	0,83	44	2000	120
14	1,58	1,41	0,20 – 1,30	0,87	61	1200	180
15	1,64	1,33	0,20 – 1,10	0,79	66	1400	170
16	1,77	1,54	0,13 – 0,90	0,74	57	2500	160
17	1,82	1,36	0,20 – 1,20	0,80	43	2600	270
18	1,51	1,65	0,15 – 1,15	0,88	49	1900	230
19	1,44	1,87	0,13 – 1,20	0,84	56	1500	190
20	1,23	1,78	0,13 – 0,80	0,77	51	2100	210

CAO, KT, TAU, n, VL – відповідають позначенням у блок-схемі;

B₁ – вартість одиниці об'єму реактора;

B₂ – додаткові капітальні витрати на один реактор.

Початкові дані, загальні для усіх варіантів:

Заданий ступінь перетворення на виході з каскаду, ХК 0,99

Ступінь перетворення на виході з J-го реактора (початкове наближення) 0

Припустима похибка обчислень, ε 0,001

НАВЧАЛЬНИЙ ПРИКЛАД

Для заданих початкових даних визначити оптимальне по сумарним капітальним витратам число реакторів N у каскаді реакторів ідеального змішування для досягнення ступеня перетворення 0,99. Розрахунки провести для 7–10 значень часу перебування τ із вказаного діапазону:

– об'ємна витрата потоку V_0 , м ³ /хв.	0,667
– діапазон значень часу перебування в i -му реакторі, хв.	0,15 – 1,1
– концентрація реагенту A у вхідному потоці, % об.	1,20
– константа швидкості реакції, хв. ⁻¹	1,60
– порядок реакції	0,75
– вартість одиниці об'єму реактора, грн./м ³	2400
– додаткові капітальні витрати на один реактор, грн.	140

Для вибраних значень часу перебування по (1.16) визначають відповідні об'єми реакторів каскаду VR_i (в припущенні, що $VR_i = \text{const}$ для кожного τ).

Використовуючи програму «RISKAS», розраховують потрібну кількість реакторів N для досягнення заданого ступеня перетворення. Результати наведені в **табл. 1.2**. Графік залежності кількості реакторів від часу перебування – **рис. 1.12**.

Для розрахованих значень N по (1.17) визначають сумарний обсяг каскаду. Величину сумарних капітальних витрат визначають по (1.18 – 1.20).

Результати розрахунків для кожного значення τ наведені в **табл. 1.2**.

Таблиця 1.2

Результати розрахунків

№ вар.	τ_i	VR_i	N	VR	z_1	z_2	z
1	0,15	0,1	14	1,4	3360	1960	5320
2	0,20	0,133	11	1,463	3511,2	1540	5051,2
3	0,25	0,167	9	1,503	3607,2	1260	4867,2
4	0,37	0,247	7	1,729	4149,6	980	5129,6
5	0,50	0,333	5	1,665	3996	700	4696
6	0,67	0,447	4	1,788	4291,2	560	4851,2
7	0,75	0,5	4	2	4800	560	5360
8	1,0	0,667	3	2,001	4802,4	420	5222,4

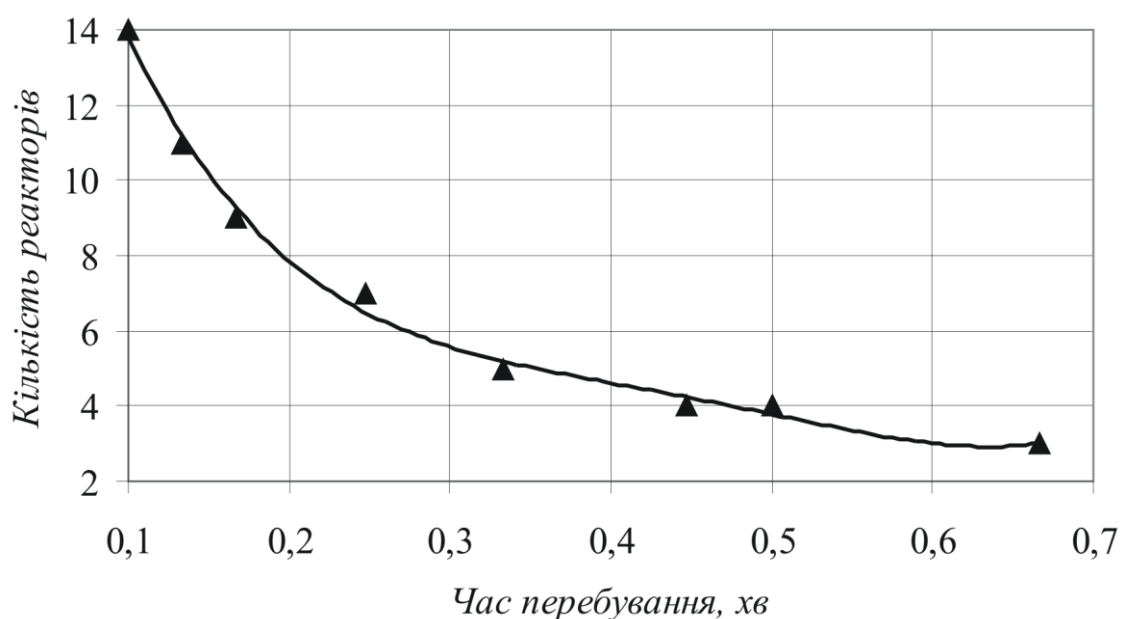


Рис. 1.12. Графік залежності кількості реакторів від часу перебування

Побудувавши графік залежності $Z=f(N)$ (рис. 1.13), визначають оптимальне число реакторів у каскаді за умовою мінімуму капітальних витрат.

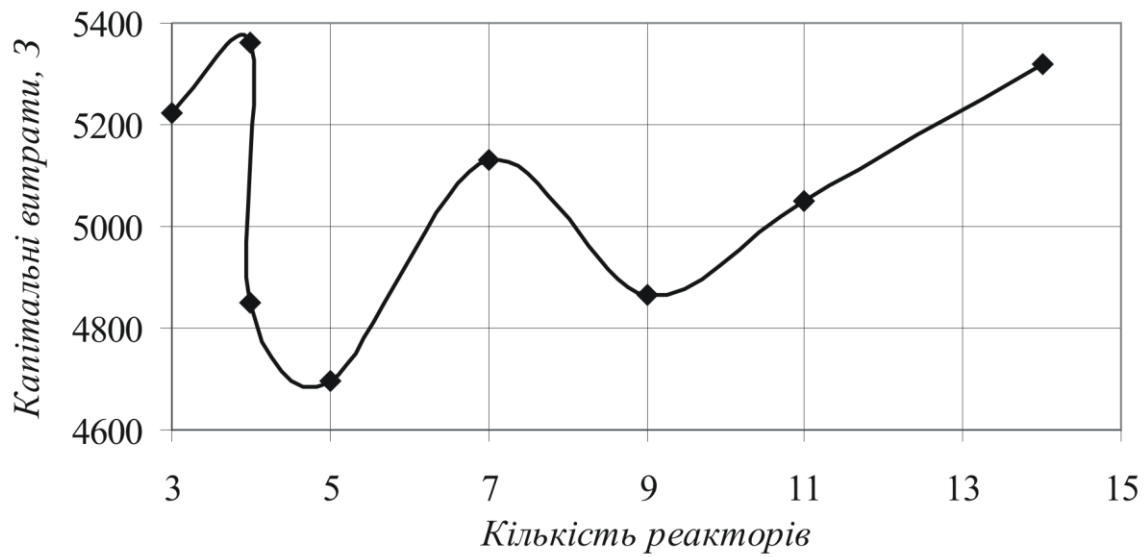


Рис. 1.13. Графік залежності сумарних капітальних витрат від кількості реакторів в каскаді

Як видно з наведених даних, оптимальна кількість реакторів, що забезпечує мінімум капітальних витрат для заданих умов, дорівнює 5.

Для знайденого оптимального варіанта графік зміни ступеня перетворення X_i через усі реактори каскаду показаний на рис. 1.14.

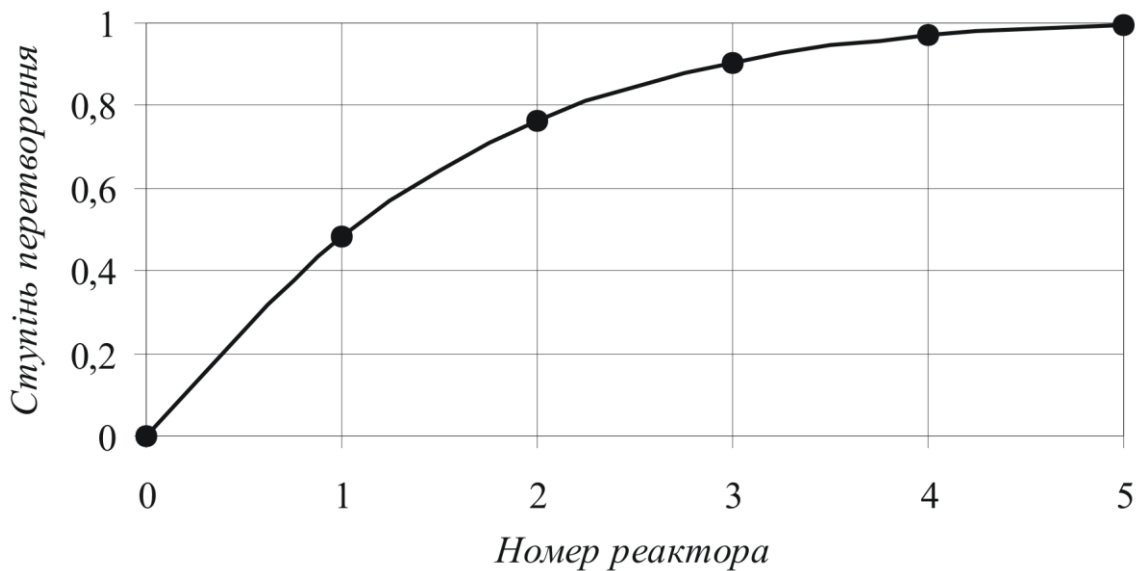


Рис. 1.14. Графік зміни ступеня перетворення X_i по реакторам оптимального каскаду

1.7.2. Розрахунок технологічної схеми з реактором каталітичного газоочищення і теплообмінником-рекуператором та оцінка області стійкої роботи схеми

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Використовуючи прикладні програми, визначити основні технологічні характеристики реактора каталітичної газоочистки. Оцінити область стійкої роботи технологічної схеми «реактор каталітичної газоочистки – теплообмінник-рекуператор».

ОПИС СХЕМИ «РЕАКТОР-ТЕПЛООБМІННИК»

При використанні каталітичного способу очищення газових викидів звичайно застосовується наступна схема (рис. 1.15).

Потік газів, що утримують токсичні речовини, направляється в міжтрубний простір зовнішнього теплообмінника 2, де нагрівається за рахунок тепла газового потоку, що виходить з реактора 1 каталітичної газоочистки, і далі надходить на вхід у реактор. На каталізаторі відбуваються реакції глибокого окислювання токсичних компонентів до діоксиду вуглецю і води.

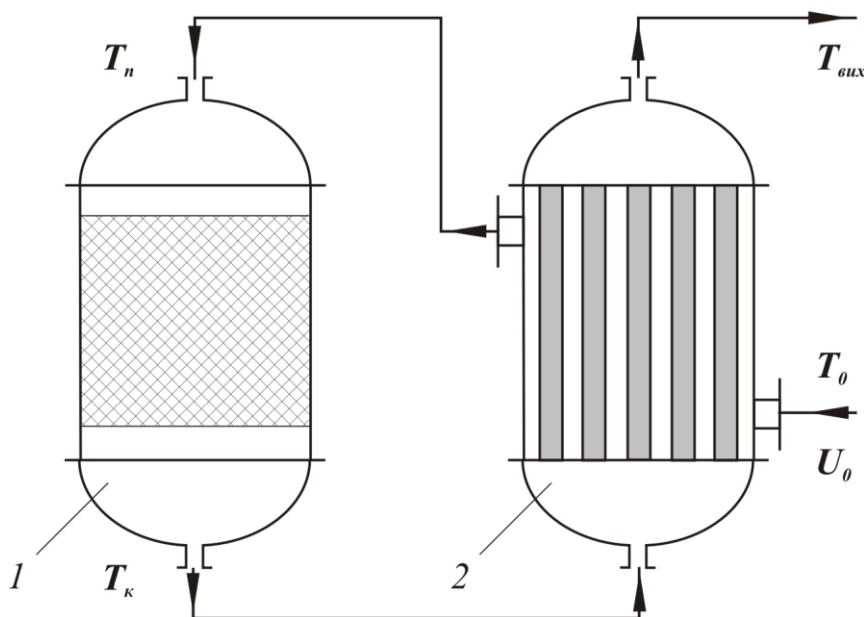
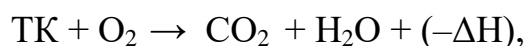


Рис. 1.15. Принципова технологічна схема процесу каталітичної очистки:
1 — каталітичний реактор; 2 — теплообмінник-рекуператор

Очищена газова суміш надходить у трубний простір зовнішнього теплообмінника, де віддає тепло свіжій реакційній суміші. Після теплообмінника очищений газовий потік викидається в атмосферу.

РОЗРАХУНОК РЕАКТОРА ГАЗООЧИСТКИ

У даному процесі протікає безповоротна екзотермічна реакція типу:



де ТК – токсичний компонент.

При розрахунку параметрів каталітичних шарів адіабатичного реактора повинна застосовуватися відповідна математична модель процесу. Для розрахунку стаціонарних режимів в шарі каталізатора для даного процесу використовується модель ідеального витіснення. Рівняння матеріального і енергетичного балансів мають вигляд:

$$-U \frac{\partial C}{\partial Z} - W = \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (1.21)$$

$$-U \cdot C_p \cdot \rho \frac{\partial T}{\partial Z} + W \cdot (-\Delta H) = C_a \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (1.22)$$

де U – лінійна швидкість суміші, м/с; ΔH – зміна ентальпії, кДж/м³; W – швидкість хімічного перетворення, 1/с; Z – поточна координата, м; T, C – поточні значення температури і концентрації, відповідно, К і % об.; C_p, C_a – теплоємність газової суміші і реакційного об'єму, відповідно, кДж/(кг·К) і кДж/(м³·К); ρ – густина газової суміші, кг/м³; t – час, с.

Рівняння кінетики в загальному випадку виражається наступною залежністю:

$$W = f(\bar{C}, T), \quad (1.23)$$

де \bar{C} – вектор концентрації $\{C_1, C_2, \dots, C_n\}$.

У математичну модель РІВ входять також граничні і початкові умови, а також обмеження. Граничні умови для РІВ – умови протікання процесу на вході в шар:

$$Z = 0: C = C_{\text{вх}}; T = T_{\text{вх}}. \quad (1.24)$$

Початкові умови встановлюють значення концентрації і температури в реакторі в початковий момент часу.

$$t = 0: C = C(Z); T = T(Z). \quad (1.25)$$

Обмеження вибираються або як по технологічним, так і по економічним розумінням. Так, наприклад

$$T_{\text{min}} < T < T_{\text{max}}; C_{\text{min}} < C < C_{\text{max}}; \text{ і ін.} \quad (1.26)$$

Система рівнянь (1.21–1.26) являє собою математичний опис РІВ в розмірній формі. При описі стаціонарних режимів в рівняннях балансів похідні за часом прирівнюються нулю.

Розрахунок параметрів процесу газоочищення проводиться з використанням програмного комплексу «GAZO». Система рівнянь (1.21–1.26) вирішується методом Рунге-Кутта четвертого порядку точності з автоматичним вибором величини кроку за координатою. Блок-схема програми «GAZO» представлена на **рис. 1.16 – 1.17**.

Позначення в блок-схемі (рис. 1.16):

1 – початок; 2 – введення початкових даних; 3 – присвоєння початкових даних; 4, 5 – блок вирішення системи рівнянь (1.21 – 1.26) (див. *рис. 1.14*); 6 – перевірка умови печатки проміжних даних; 7 – печатка проміжних даних; 8 – збільшення поточної координати на крок; 9 – перевірка умови досягнення виходу з шару; 10 – запам'ятовування результатів, що отримані на поточному кроці; 11 – розрахунок нового значення кроку; 12 – перевірка виконання умови для вибору величини кроку h ; 13-16 – блок, що забезпечує досягнення координати $\xi = 1$; 17 – печатка значень параметрів на виході з шару; 18 – закінчення програми.

Лістинг програми «GAZO» наведений у додатку 2.

У блок-схемі і програмі прийняті наступні позначення:

VN_i – початкове розподілення концентрації і температури;

h – крок пошуку;

ξ – безрозмірна координата;

PR – частота печатки;

V_i, R_i, F_i, S_i, Y_i – допоміжні масиви;

Δ, Δ_1 – похибки розрахунків концентрації і температури;

Δ_k – розбіжність між координатою виходу з шару і поточною координатою;

QQ – лічильник.

Індекс процесу в програмі «GAZO» вибирається за заданим компонентом. Вводяться початкові дані і розраховуються поля концентрацій і температур в шарі каталізатора. За результатами розрахунків на ЕОМ підбирають параметри роботи шару каталізатора – температуру суміші на вході ($T_{вх}$) і час контакту (τ_k), при яких досягається потрібна міра окислення (x) і виконуються умови по термостійкості каталізатора.

Для процесу, що протікає в адіабатично працюючому шарі каталізатора, справедливе співвідношення:

$$T_{вих} = T_{вх} + \Delta T_{ад} \cdot x, \quad (1.27)$$

де $T_{вх}, T_{вих}$ – температури на вході і на виході з шара каталізатора, відповідно, К; x – ступінь перетворення, частки; $\Delta T_{ад} = \Delta T_{ад}^{1\%} \cdot C_0$ – адіабатичний розігрів реакційної суміші при повному ступені перетворення, К; C_0 – концентрація компонента у вхідній суміші, % об; $\Delta T_{ад}^{1\%} = (-\Delta H)/(c_p \cdot \rho)$ – адіабатичний розігрів реакційної суміші при повному ступені перетворення, якщо концентрація компонента дорівнює 1%.

Фізичне значення параметра $\Delta T_{ад}$ таке: він показує, на скільки може розігрітися реакційна суміш при повному ступені перетворення.

Після визначення величини адіабатичного розігрівання необхідно оцінити необхідне число шарів каталізатора для здійснення даного процесу при заданих обмеженнях. Необхідна кількість шарів визначається по формулі:

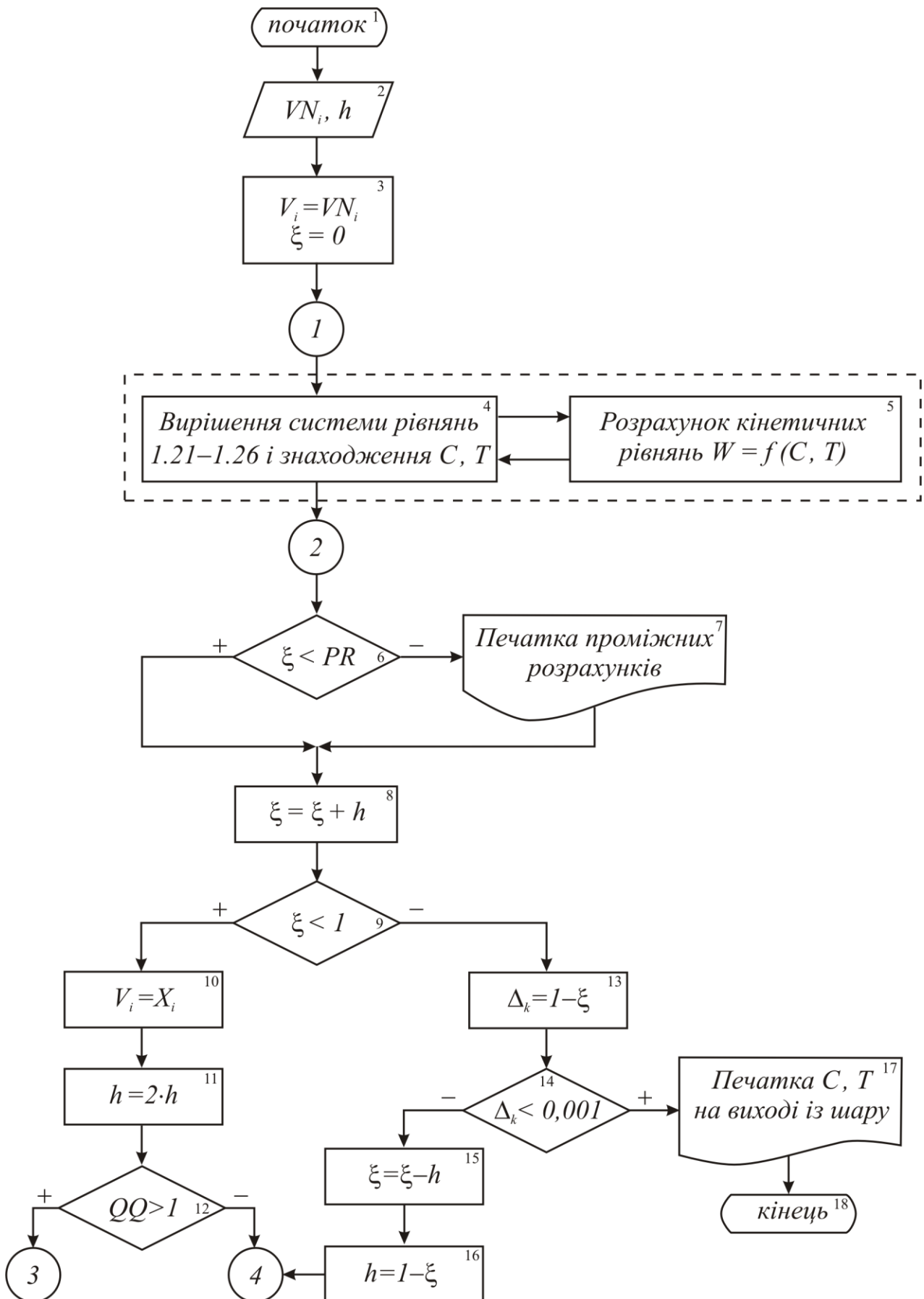


Рис. 1.16. Блок-схема розрахунку адіабатичного шару каталізатора по моделі ідеального витиснення

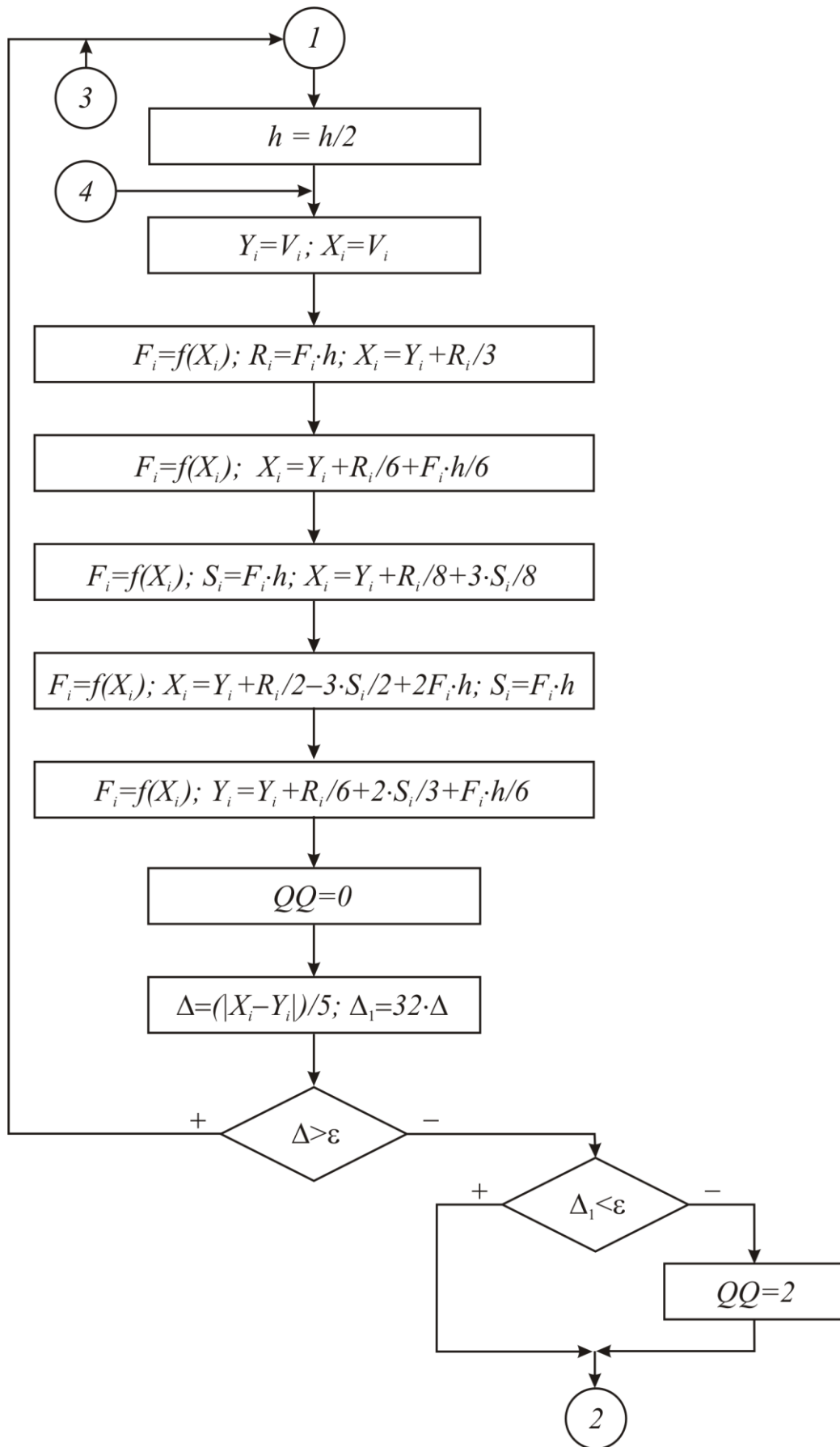


Рис. 1.17. Блок-схема блоку розрахунку рівнянь (1.21–1.26)

$$N = \Delta T_{\text{ад}} / \Delta T_{\text{доп}}, \quad (1.28)$$

де $\Delta T_{\text{доп}}$ – допустима зміна температури в шарі каталізатора.

Для мідно-хромового каталізатора КТ-12-8, що використовується в різних установках газоочищення, допустимий інтервал роботи становить 250–650°C. Відповідно кількості шарів визначають ступінь перетворення у кожному шарі.

Для схеми «реактор – зовнішній теплообмінник» можливе існування хитливих стаціонарних станів. Тому необхідно визначити область стійкої роботи даної схеми. У загальному випадку для визначення стійкості будь-якого об'єкта необхідно досліджувати поведінку його в часі після впливу відхилень по вхідних параметрах. Однак у ряді випадків немає необхідності прибігати до складного апарата дослідження стійкості точними методами, а можна користатися критеріями стійкості – формулами, що дозволяють визначати стійкість об'єкта по його параметрах. Так, для простих реакторних схем справедливий підхід, заснований на обчисленні параметричної чутливості стаціонарних режимів.

Під простою схемою розуміється схема, у якій мається тільки один зворотний зв'язок – вплив результатів протікання процесу на його початкові умови. У розглянутому випадку таким зв'язком є теплообмін між газовим потоком, що виходить з реактора, і реакційною сумішшю, що надходить у реактор.

Параметрична чутливість служить кількісною мірою зміни вихідних показників процесу (y) при відхиленні вхідних параметрів (x). Вона визначається як частинна похідна функції, що характеризує режим у реакторі (наприклад, температури виходу) за відповідним вхідним параметром (наприклад, температури входу)

$$\Pi = \frac{\partial y_i}{\partial x_i}. \quad (1.29)$$

При невеликих відхиленнях вхідних параметрів замість (1.29) можна користатися наступним виразом

$$\Pi = \frac{\Delta y_i}{\Delta x_i}. \quad (1.30)$$

УМОВА СТІЙКОСТІ

Область стійкості являє собою сукупність значень параметрів, для яких дотримується умова стійкості – швидкість виділення тепла повинна бути менша швидкості тепловідводу:

$$\frac{\partial q_p}{\partial T} < \frac{\partial q_T}{\partial T}. \quad (1.31)$$

де q_p – кількість тепла, що виділяється за рахунок хімічної реакції, Вт; q_T – кількість тепла, що відводиться за рахунок потоку реакційної суміші, Вт; T – температура, К.

Для схеми «реактор – зовнішній теплообмінник» вона визначається нерівністю

$$\frac{\partial T_K}{\partial T_{II}} < 1 + \frac{1}{\gamma}, \quad (1.32)$$

де γ – параметр тепловідводу:

$$\gamma = \frac{k_T F}{U_0 c_p \rho}, \quad (1.33)$$

$\frac{\partial T_K}{\partial T_{II}}$ – параметрична чутливість реактора по каналу «температура входу (T_{II}) – температура виходу (T_K)»; k_T – коефіцієнт тепловіддачі, Вт/(м²·К); F – площа поверхні теплопередачі, м²; U_0 – об'ємна витрата газової суміші, м³/с; c_p – питома теплоємність газової суміші, кДж/(кг·К); ρ – густина газової суміші, кг/м³.

ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРА ТЕПЛОВІДВОДУ

Поверхню теплопередачі можна визначити з рівняння теплопередачі для поверхневих теплообмінників

$$F = \frac{Q}{k_T \Delta t_{cp}}, \quad (1.34)$$

де Q – тепловий потік, Вт; Δt_{cp} – середня різниця температур гарячого і холодного потоків, К.

Тепловий потік (кількість переданої теплоти) дорівнює

$$Q = U_0 \cdot c_p \cdot \rho \cdot \Delta T, \quad (1.35)$$

де ΔT – зміна температури теплоносія, К.

Підставивши (1.34) і (1.35) у вираз (1.23), одержимо:

$$\gamma = \frac{\Delta T}{\Delta t_{cp}}. \quad (1.36)$$

Для визначення ΔT і Δt_{cp} необхідно розрахувати температуру газів, що прореагували, на виході з теплообмінника за рівнянням теплового балансу

$$U_0^T \cdot C_p^T \cdot \rho^T (T_{вх}^T - T_{вих}^T) = 1,03 \cdot U_0^{MT} \cdot C_p^{MT} \cdot \rho^{MT} (T_{вих}^{MT} - T_{вх}^{MT}), \quad (1.37)$$

де $T_{вх}$, $T_{вих}$ – температури на вході і виході, К; 1,03 – коефіцієнт, що враховує тепловтрати в навколишнє середовище. Індекси Т і ТМ позначають трубний і міжтрубний простір відповідно.

Оскільки та ж сама кількість газу проходить по трубному і міжтрубному простору, то з достатньою точністю можна вважати, що

$$U_0^T \cdot C_p^T \cdot \rho^T \cong U_0^{MT} \cdot C_p^{MT} \cdot \rho^{MT}.$$

Тоді рівняння (1.37) набуде вигляду

$$(T_{\text{вх}}^T - T_{\text{вих}}^T) = 1,03(T_{\text{вих}}^{MT} - T_{\text{вх}}^{MT}) \quad (1.38)$$

або в позначеннях *рис. 1.15*

$$(T_{\text{к}} - T_{\text{вих}}) = 1,03(T_{\text{п}} - T_0)$$

З рівняння (1.38) знаходиться $T_{\text{вих}}^T (T_{\text{вих}})$.

РОЗРАХУНОК ПАРАМЕТРИЧНОЇ ЧУТЛИВОСТІ

Для обраного базового варіанта необхідно визначити параметричну чутливість по каналу «температура виходу – температура входу». Для цього необхідно підготувати початкові дані для розрахунку за програмою «GAZO.EXE». У діапазоні $-40^\circ \dots +10^\circ$ від обраної температури входу варто взяти 5–6 точок (опорні температури), включаючи і базовий варіант. Для кожної опорної температури при знайденому раніше значенні часу контакту необхідно прорахувати стаціонарний режим при зміні опорної температури на $\pm 3^\circ$. Середнє арифметичне значення параметричної чутливості при позитивному і негативному відхиленнях і буде параметричною чутливістю при даній опорній температурі.

Оскільки на вході в реактор газоочистки можливі коливання по концентрації токсичного компонента, то необхідно перевірити виконання умови стійкості для нових значень. Для цього треба виконати аналогічні розрахунки при відхиленнях по концентрації на вході – на $\pm 30\%$ від заданого значення.

ОПИС ПРОГРАМИ «GAZO»

Для визначення основних характеристик реактора каталітичного очищення газових викидів від токсичних домішок використовується програмний комплекс «GAZO», який дозволяє проводити розрахунки для вісімнадцяти токсичних компонентів. Даний програмний комплекс працює таким чином. Після запуску програми «GAZO.EXE» на екрані з'являється вікно з назвою програми. Натисканням клавіш «ENTER» і «ALT» переходять у головну панель в підменю «Розрахунок», натискають клавішу «ENTER». На екрані – головне меню програми з вікнами для введення початкових даних (*рис. 1.18*).

Встановивши курсор у вікні «Речовина» натискають клавішу «ENTER». На екрані з'являється вікно з переліком усіх компонентів. Вибравши потрібний компонент і встановивши на ньому курсор, натискають клавішу «ENTER».

Програма повертається в головну панель і в рядку «Речовина» фіксується обраний компонент. Далі вводять наступні вхідні дані:

- температура на вході, °C;
- концентрація обраної речовини на вході, % об.;
- час контакту, с.

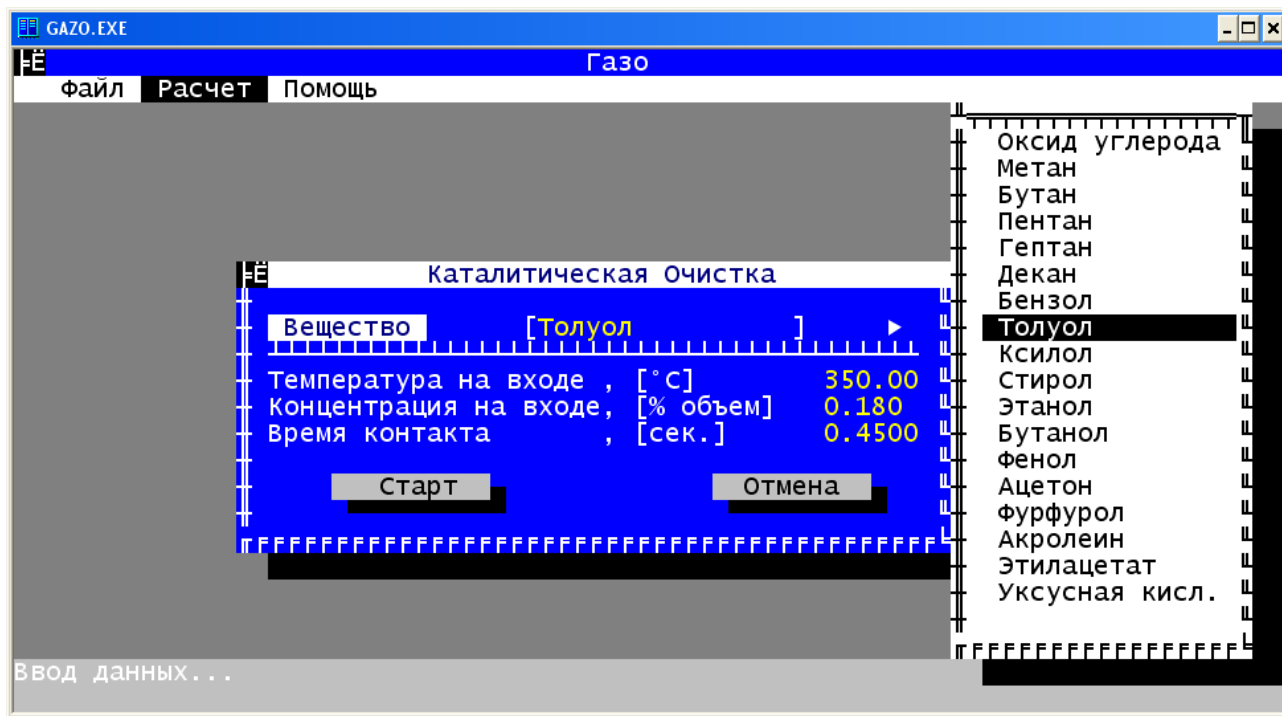


Рис. 1.18. Вікно програмного комплексу «GAZO»

Після завдання вхідних даних курсор переводять на вікно «СТАРТ» і натискають клавішу «ENTER» – програма запущена для виконання розрахунків.

просмотр 1.RES - Far

D:\...кументы\5 курс\Программы\1.RES DOS 1551 Кол 0 100%

Расчет адиабатического слоя катализатора
Процесс очистки отходящих газов от Тoluола
Исходные данные:
Температура..... 350.00
Концентрация..... 0.18
Время контакта..... 0.4500

Координата, доли	Температура, °C	Концентрация, % об.	Степ. прев., доли	Время конт., с
0.000	350.00	00.180	0.0000	0.0000
0.010	352.66	00.178	0.0112	0.0045
0.120	387.58	00.151	0.1584	0.0540
0.210	426.08	00.122	0.3207	0.0945
0.320	486.21	00.077	0.5742	0.1440
0.420	540.19	00.036	0.8017	0.1890
0.520	571.85	00.012	0.9351	0.2340
0.620	583.11	00.003	0.9826	0.2790
0.720	586.21	00.001	0.9956	0.3240
0.820	586.99	00.000	0.9989	0.3690
0.920	587.18	00.000	0.9997	0.4140
1.000	587.22	00.000	0.9999	0.4500

1 2 3 4 5 Печать 6 7 8 Перейт 9 Видео 10

Рис. 1.19. Приклад результатів розрахунків за програмою «GAZO»

Результати розрахунків (див. *рис. 1.19*) виводяться як таблиця зміни по довжині шару катализатора наступних параметрів:

- безрозмірна довжина шару, частки;
- концентрація обраної речовини, % об.;
- температура, °C;
- ступінь перетворення, долі;
- час контакту, с.

В програмі початкові дані записуються в окремі вікна панелі і при переході до розрахунку нового варіанта необхідно виправити значення тільки тих величин, що змінюються. Результати розрахунку виводяться на екран дисплея. Приклад результатів розрахунків за програмою «GAZO» приведено на *рис. 1.19*. Програмою передбачено запис результатів роботи на диск. Для цього потрібно вказати ім'я файлу.

НАВЧАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

1. Використовуючи програму «GAZO.EXE», в заданому діапазоні температур суміші на вході в шар катализатора підбираються параметри $T_{вх}$ і час контакту, при яких досягається потрібний ступінь окислювання на виході із шару катализатора (92–94%).
2. Для кожної серії розрахунків при незмінній початковій концентрації c_n визначається параметрична чутливість по каналу «температура виходу – температура входу»

$$\Pi = \frac{\Delta T_i^k}{\Delta T_i^n} = \frac{T_i^k - T_6^k}{T_i^n - T_6^n}, \quad (1.39)$$

де індекс «б» відноситься до параметрів базового варіанта.

За знайденими величинами Π_i будується графік у координатах $\Pi_i=f(T_n)$ для різних концентрацій на вході c_n (рис. 1.20). На цьому ж графіку будується лінія, що відповідає умові стійкості

$$y = 1 + \frac{1}{\gamma}$$

Області всіх режимів, що проходять нижче цієї лінії, відповідають стійким режимам роботи схеми «реактор – зовнішній теплообмінник».

Якщо в результаті аналізу виявиться, що область стійкої роботи реактора мала, то доцільно підібрати також умови тепловідводу (k_T і F), при яких область стійкості буде прийнятною для практики.

ПОЧАТКОВІ ДАНІ

Початкові дані приведені в *табл. 1.3*. Усі теплофізичні характеристики варто приймати для повітря. Припустимий інтервал роботи каталізатора 250–650°C.

Таблиця 1.3

Початкові дані

№	Компонент	Витрата, m^3/c	Температура $T_0, ^\circ C$	Концентрація, % об.	Адіабатичний розігрів, $K/1\%$
1	Бензол	0,55	25	0,25	1100
2	Стирол	0,73	40	0,19	1483
3	Бутанол	0,98	65	0,33	907
4	Бутан	1,23	32	0,31	864
5	Фенол	1,47	47	0,30	1021
6	Пентан	1,69	55	0,26	1179
7	Толуол	1,87	20	0,22	1318

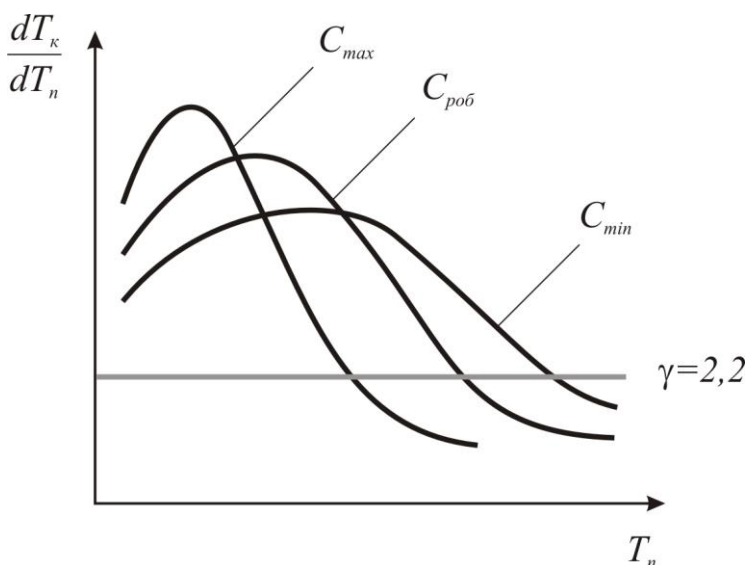


Рис. 1.20. Графік залежності параметричної чутливості від температури входу

8	Етанол	2,03	33	0,52	456
9	СО	2,22	44	2,56	91
10	Гептан	2,55	55	0,21	1495
11	Бензол	2,77	26	0,29	1100
12	Фенол	2,99	34	0,25	1021
13	Ксилол	3,06	58	0,16	1517
14	Толуол	3,13	41	0,22	1318
15	Бутанол	3,28	16	0,29	907
16	Фенол	3,33	72	0,18	1021

НАВЧАЛЬНИЙ ПРИКЛАД

Визначити основні технологічні характеристики реактора каталітичної газоочистки та оцінити область стійкої роботи технологічної схеми «реактор каталітичної газоочистки – теплообмінник-рекуператор» для наступних даних:

- температура суміші, що поступає на очистку, °С 30
- концентрація толуолу на вході в реактор, % об. 0,180
- допустимий інтервал роботи каталізатора, °С 250–650

Для оцінки температури входу в шар каталізатора із (1.27) необхідно визначити величину $\Delta T_{ад}$. За даними **табл. 1.3**

$$\Delta T_{ад} = \Delta T_{ад}^{1\%} \cdot C_0 = 1318 \cdot 0,180 = 237,2.$$

Тоді при $T_{вих} = 620^\circ\text{C}$ і $X=0,93$ температура входу в шар не повинна перевищувати:

$$T_{вх} = T_{вих} - \Delta T_{ад} \cdot x = 620 - 237,2 \cdot 0,93 = 400^\circ\text{C}.$$

Приймаємо $T_{вх} = 350^\circ\text{C}$

Необхідна кількість шарів визначається за (1.28):

$$N = \Delta T_{ад} / \Delta T_{доп} = 237,2 / (650 - 250) = 0,59$$

Тобто, процес можна реалізувати в одному шарі каталізатора.

Далі для прийнятого значення $T_{вх}$ підбирається час контакту, при якому досягається потрібний ступінь окислювання на виході із шару каталізатора (92–94%). Для заданого складу суміші він складає 0,23 с, при ньому ступінь перетворення складає 0,928. Цей варіант є базовим.

Для визначення параметричної чутливості по каналу «температура виходу – температура входу» у діапазоні $-50^\circ \dots +30^\circ$ від обраної температури входу беремо 5–8 точок (опорні температури), включаючи і базовий варіант. Для кожної опорної температури при знайденому раніше значенні часу контакту розрахуємо стаціонарний режим, а також при зміні опорної температури на $\pm 3^\circ$. Середнє арифметичне значення параметричної чутливості при позитивному і негативному відхиленнях і буде параметричною чутливістю при даній опорній температурі. Результати розрахунків – в **табл. 1.4**.

Для визначення параметру тепловідводу за (1.36) необхідно розрахувати ΔT і Δt_{cp} . За рівнянням теплового балансу (1.38) знайдемо температуру суміші, що прореагувала, на виході з теплообмінника

$$(570 - T_{\text{вих}}) = 1,03 \cdot (350 - 30)$$

$$T_{\text{вих}} = 240,4 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Середня різниця температур гарячого і холодного потоків (Δt_{cp}):

$$\Delta t_{cp} = [(570 + 240,4)/2 - (350 + 30)/2] = 215,2 \text{ } ^\circ\text{C}$$

Зміну температури розрахуємо за холодним теплоносієм

$$\Delta T = 350 - 30 = 320 \text{ } ^\circ\text{C}.$$

Тоді

$$\gamma = 320 / 215,2 = 1,487.$$

Умова стійкості

$$y = 1 + \frac{1}{\gamma} = 1,673.$$

За знайденими величинами $\Pi_{i, \text{сер}}$ будемо графік у координатах $\Pi_{i, \text{сер}} = f(T_{\text{п}})$ для концентрацій толуолу на вході c_n (*рис. 1.21*). На цьому ж графіку будемо лінію, що відповідає умові стійкості $y = 1,673$.

З отриманих результатів видно, що стійкі режими роботи схеми «реактор – зовнішній теплообмінник» при досліджених змінах вхідних параметрів забезпечуються при температурах $T_{\text{п}}$ більш $380 \text{ } ^\circ\text{C}$.

Таблиця 1.4

Результати розрахунків параметричної чутливості

T_{ex}	$C=0,18$			$C=0,126$			$C=0,234$		
	$T_{вих}$	Π_i	$\Pi_{i,сеп}$	$T_{вих}$	Π_i	$\Pi_{i,сеп}$	$T_{вих}$	Π_i	$\Pi_{i,сеп}$
307	422	3,7		368,8	2,233		520,1	6,2	
310	433,1		3,75	375,5		2,25	538,7		6,067
313	444,5	3,8		382,3	2,667		556,5	5,933	
317	460,1	3,967		391,7	2,367		578	4,667	
320	472		3,95	398,8		2,4	592		2,889
323	483,8	3,933		406,1	2,433		604	4	
327	499,3	3,767		415,9	2,5		617,1	2,667	
330	510,6		3,684	423,4		2,5	625,1		2,25
333	521,4	3,6		430,9	2,5		631,8	2,233	
337	534,9	3,1		441	2,533		639,3	1,567	
340	544,2		2,983	448,6		2,5	644		1,5
343	552,8	2,867		456	2,467		648,3	1,433	
347	563,1	2,3		465,7	2,467		653,5	1,167	
350	570		2,217	473,1		2,417	657		1,15
353	576,4	2,133		480,2	2,367		660,4	1,133	
357	583,9	1,7		489,3	2,2		664,8	1,067	
360	589		1,633	495,9		2,167	668		1,05
363	593,7	1,567		502,3	2,133		671,1	1,033	
367	599,5	1,333		510,4	1,933		675,2	1,033	
370	603,5		1,3	516,2		1,883	678,3		1,017
373	607,3	1,267		521,7	1,833		681,3	1	
377	612,1	1,167		528,7	1,633		685,4	1	
380	615,6		1,15	533,6		1,617	688,4		1
383	619	1,133		538,4	1,6		691,4	1	

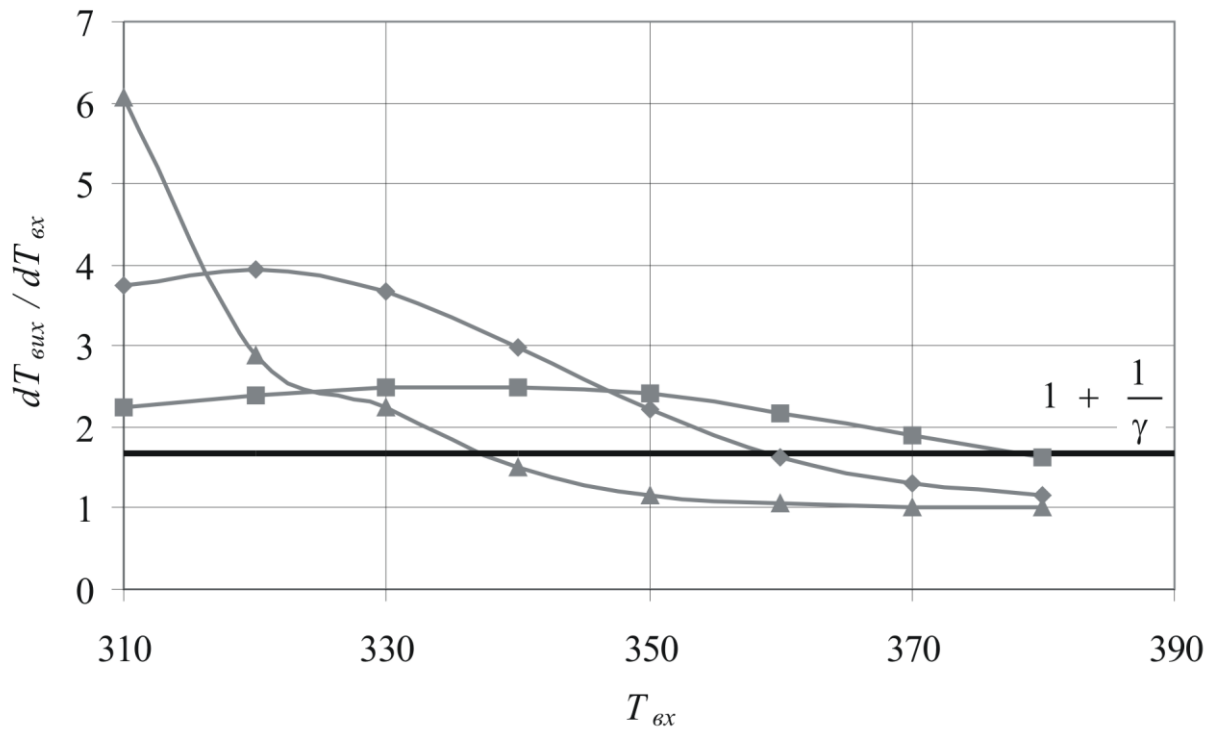


Рис. 1.21. Графік залежності параметричної чутливості від температури входу

2. АНАЛІЗ ХТС

2.1. СПОСОБИ ПРЕДСТАВЛЕННЯ СТРУКТУРИ ХТС

Для структурного аналізу ХТС використовують методи теорії графів. Під **орієнтованим графом** $G == (X, U)$ розуміють геометричну фігуру на площині, що складається з множини вершин (точок) X і множини орієнтованих дуг U , їх з'єднуючих (*рис. 2.1*). Послідовність орієнтованих дуг, що дозволяє пройти з однієї вершини в іншу, називається **шляхом** і зображується послідовністю відповідних вершин. Шлях, що містить K дуг, назовемо шляхом довжиною K .

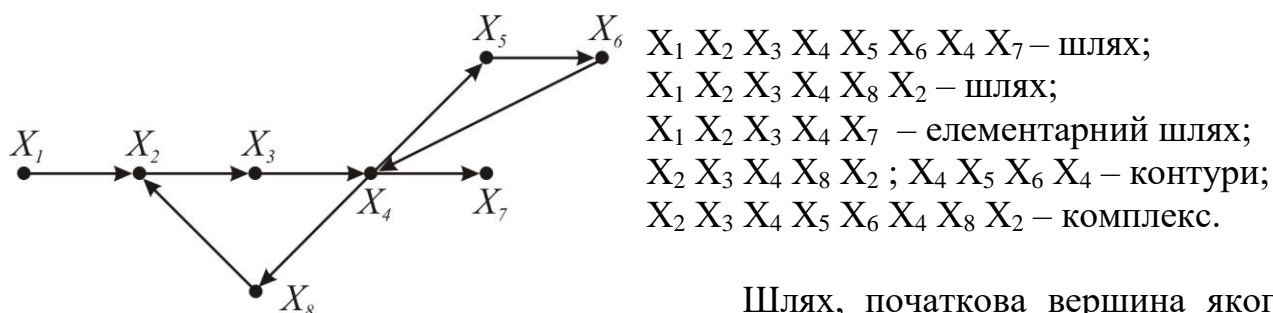


Рис. 2.1. Граф ХТС

Шлях, початкова вершина якого збігається з кінцевою, причому кожна вершина за винятком початкової, що проходиться тільки один раз, називається **елементарним контуром**, чи просто **контуром**. Контури, що складаються з однакових вершин, вважаються однаковими.

Вершини, з'єдані дугою, називаються **інцидентними**. Для інцидентних вершин графа вводиться поняття позитивної і негативної інцидентності. Вершина, у яку входить дуга, називається **позитивно інцидентною** стосовно тієї вершини, з якої ця дуга виходить. Вершина, з якої виходить дуга, називається **негативно інцидентною** стосовно тієї вершини, у яку ця дуга входить.

Контури графа, що мають хоча б одну спільну вершину, називаються **зв'язаними**. Множина зв'язаних контурів графа утворює так званий **комплекс**. Іншими словами, **комплекс** – це частина графа, вершини якого мають наступні властивості:

- кожна з вершин і дуг комплексу входить в один з контурів графа;
- якщо вершина I входить у комплекс, то в цей комплекс входять також усі вершини, що входять у контури, що містять вершину I ;
- для будь-яких двох вершин комплексу існує з'єднуючий їх шлях.

Окремі ізольовані контури графа і його вершини можна розглядати як **вироджені комплекси**.

Кожній ХТС у залежності від розв'язуваної задачі можна поставити у відповідність:

- матеріальний потоковий граф по спільній масовій витраті (МПГ);
- тепловий потоковий граф (ТПГ);
- параметричний потоковий граф (ППГ).

При такому представленні ХТС вершини графа відповідають її елементам, а дуги — технологічним потокам. Орієнтація дуг збігається з напрямком потоків.

На графі ХТС указуються тільки ті вершини, що відповідають елементам системи, які здійснюють перетворення параметрів потоків. Надалі будемо вважати, що ХТС відповідає ППГ, що дає найбільше повне представлення про її структуру.

При зображенні графів ХТС зовнішнє середовище умовно позначається фіктивним нульовим елементом, а відповідна їй вершина має нульовий номер. З цієї вершини виходять дуги, що відповідають потокам, які надходять у систему з зовнішнього середовища. У нульову вершину спрямовуються дуги, що відповідають потокам, які виходять із ХТС у зовнішнє середовище (рис. 2.2).

Інформація, що міститься в графі, може бути також представлена у вигляді різних матриць.

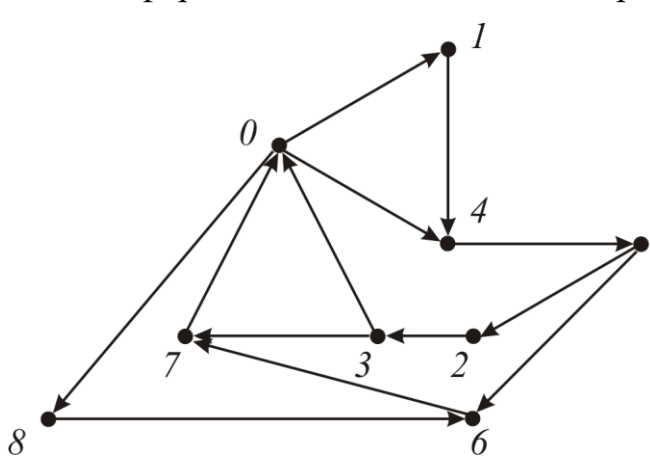


Рис 2.2. Граф ХТС

Зв'язок графа і матриць має важливе значення, тому що дозволяє перевести графічну інформацію (структурні особливості системи) на мову чисел. При вирішенні різних задач структурного аналізу використовуються різні види представлення того самого графа.

Один з способів представлення структури ХТС – це **матриця зв'язків (матриця суміжності)**. Вона являє собою квадратну таблицю. Кількість

стовпців і рядків у ній дорівнює числу вершин у графі ХТС. Рядки і стовпці матриці нумеруються. Номери рядків указують номери вершин графа ХТС, з яких виходять дуги, а номери стовпців указують номери вершин графа, у які входять дуги (табл. 2.1).

Якщо вершини графа зв'язані дугою, то на перетинанні відповідних рядка і стовпця матриці зв'язків ставиться 1. Всі інші елементи матриці зв'язків дорівнюють 0. Дорівнюють нулю і всі діагональні елементи матриці.

Сума одиниць у рядку матриці зв'язків обумовлює число вихідних потоків з елемента, що відповідає номеру рядка. Сума одиниць у стовпці дорівнює числу потоків, що входять до елемента ХТС, що відповідає номеру стовпця.

Як видно з **табл. 2.1**, матриця зв'язків ХТС є сильно розрідженою, тобто багато її елементів дорівнюють нулю і, як правило, нулі не пишуться. Більш компактне представлення структури ХТС можливе за допомогою так званого **списку зв'язків**. Він містить два стовпці. У лівому стовпці вказуються номери вершин графа, причому кожна вершина повторюється стільки разів, скільки потоків виходить з відповідного елемента. У правому стовпці записуються

номери вершин, у які входять дуги, що виходять з елементів, указаних у лівому стовпці (*табл. 2.2*).

Таблиця 2.1

Матриця зв'язків ХТС, що зображена на рис. 2.2

<i>I</i>	<i>J</i>								
	<i>0</i>	<i>1</i>	<i>2</i>	<i>3</i>	<i>4</i>	<i>5</i>	<i>6</i>	<i>7</i>	<i>8</i>
<i>0</i>	0	1	0	0	1	0	0	0	1
<i>1</i>	0	0	0	0	1	0	0	0	0
<i>2</i>	0	0	0	1	0	0	0	0	0
<i>3</i>	1	0	0	0	0	0	0	1	0
<i>4</i>	0	0	0	0	0	1	0	0	0
<i>5</i>	0	0	1	0	0	0	1	0	0
<i>6</i>	0	0	0	0	0	0	0	1	0
<i>7</i>	1	0	0	0	0	0	0	0	0
<i>8</i>	0	0	0	0	0	0	1	0	0

Таблиця 2.2

Список зв'язків ХТС, зображеної на рис. 2.2

Номери вершин графа ХТС, з яких виходять дуги	Номери вершин графа ХТС, в які входять дуги	Номери вершин графа ХТС, з яких виходять дуги	Номери вершин графа ХТС, в які входять дуги
0	1	4	5
0	4	5	2
0	8	5	6
1	4	6	7
2	3	7	0
3	0	8	6
3	7		

Структуру ХТС можна також представити за допомогою А- і В-таблиць зв'язків (*табл.2.3 і 2.4*).

Таблиця 2.3

А-таблиця зв'язків ХТС, зображеної на рис. 2.2

Вершина графа ХТС	Позитивно-інцидентні вершини	Вершина графа ХТС	Позитивно-інцидентні вершини
0	1, 4, 8	5	2, 6
1	4	6	7
2	3	7	0
3	0, 7	8	6
4	5		

Модифікацією А- і В-таблиць зв'язків є NA– і NE– таблиці. В таблиці NA (аналог А-таблиці) у *i*-тім рядку стоять номери дуг, що виходять з *i*-тої

вершини, а в NE (аналог В-таблиці) у j -тім рядку стоять номери дуг, що входять у j -тою вершину графа.

Таблиця 2.4

В-таблиця зв'язків ХТС, зображеної на рис. 2.2

Вершина графа ХТС	Негативно-інцидентні вершини	Вершина графа ХТС	Негативно-інцидентні вершини
0	3, 7	5	4
1	0	6	5, 8
2	5	7	3, 6
3	2	8	0
4	0, 1		

2.2. ПОНЯТТЯ ПРО РОЗРАХУНОК РОЗІМКНУТИХ І ЗАМКНУТИХ ХТС

Розглянемо розімкнуту ХТС (рис. 2.3, а).

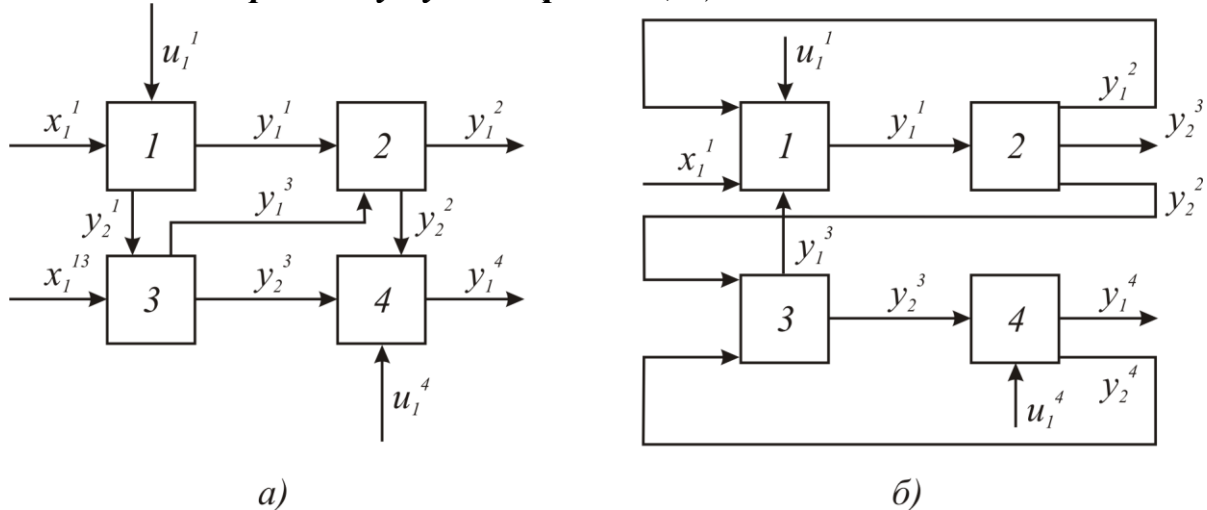


Рис. 2.3. Розімкнута (а) і замкнута (б) ХТС

Нехай математичний опис стаціонарного режиму цієї ХТС має наступний вид:

<i>1-й елемент</i>	<i>2-й елемент</i>	<i>3-й елемент</i>	<i>4-й елемент</i>
$y_1^1 = f_1(x_1^1, u_1^1)$	$y_1^2 = f_3(y_1^1, y_1^3)$	$y_1^3 = f_5(x_1^3, y_2^1)$	$y_1^4 = f_7(y_2^3, y_2^2, u_1^4)$
$y_2^1 = f_2(x_1^1, u_1^1)$	$y_2^2 = f_4(y_1^1, y_1^3)$	$y_2^3 = f_6(x_1^3, y_2^1)$	

Початкові дані для розрахунку:

значення вхідних потоків ХТС — $\bar{P}_{\text{вх}} = (x_1^1, x_1^3)$;

значення управління — $\bar{u} = (u_1^1, u_1^4)$.

Необхідно знайти:

значення проміжних потоків — $y_1^1, y_2^1, y_2^2, y_1^3, y_2^3$;

значення вихідних потоків ХТС — $\bar{P}_{\text{вих}} = (y_1^2, y_1^4)$.

Вирішення такої задачі не представляє труднощів, якщо послідовно вирішувати рівняння для елементів 1, 3, 2, 4. Тому основна задача, що виникає при розрахунку ustalених режимів ХТС – це визначити порядок розрахунку елементів. Останній називають обчислювальною послідовністю розімкнутої ХТС (ОПРС).

Після визначення ОПРС, послідовно вирішуючи рівняння відповідних окремих елементів, можна зробити остаточний розрахунок ХТС. Слід зазначити, що для замкнутих ХТС визначення ОПРС є проміжним етапом розрахунку.

Розглянемо *замкнуту ХТС* (рис. 2.3, б). Нехай математичний опис стаціонарного режиму цієї ХТС має вид:

1-й елемент

$$y_1^1 = f_1(x_1^1, u_1^1, y_1^3, y_1^2)$$

2-й елемент

$$y_1^2 = f_2(y_1^1)$$

$$y_2^2 = f_3(y_1^1)$$

$$y_3^2 = f_4(y_1^1)$$

3-й елемент

$$y_1^3 = f_5(y_2^2, y_2^4)$$

$$y_2^3 = f_6(y_2^2, y_2^4)$$

4-й елемент

$$y_1^4 = f_7(y_2^3, u_1^4)$$

$$y_2^4 = f_8(y_2^3, u_1^4)$$

Вихідні дані для розрахунку системи:

$$\bar{P}_{\text{вх}} = (x_1^1); \quad \bar{u} = (u_1^1, u_1^4).$$

Потрібно знайти:

$$\bar{P} = (y_1^1, y_1^2, y_1^3, y_1^4, y_2^3, y_2^4); \quad \bar{P}_{\text{вих}} = (y_3^2, y_1^4).$$

Вирішення цієї задачі може бути знайдено двома принципово різними шляхами. *Перший шлях* зв'язаний з безпосереднім вирішенням рівнянь математичного опису. При *другому підході* розрахунок замкнутої ХТС зводиться до багаторазового послідовного розрахунку окремих елементів розімкнутої ХТС, що відповідає даній замкнутій. Це так званий модульний послідовний розрахунок ХТС. Для цього замкнута ХТС шляхом розриву деяких зв'язків між елементами перетворюється в розімкнуту, а для того щоб стаціонарний режим у цих двох ХТС був однаковий, необхідна рівність параметрів потоків у місцях розриву зв'язків.

На (рис. 2.4) зображена розімкнута ХТС, що відповідає замкнутій системі, що приведена на рис. 2.3, б.

Для елементів 2 і 3 змінюється вид математичних описів:

2-й елемент

$$y_1^2 = f_9(x_1^2)$$

$$y_2^2 = f_{10}(x_1^2)$$

3-й елемент

$$y_1^3 = f_{12}(y_2^2, x_1^3)$$

$$y_2^3 = f_{13}(y_2^2, x_1^3)$$

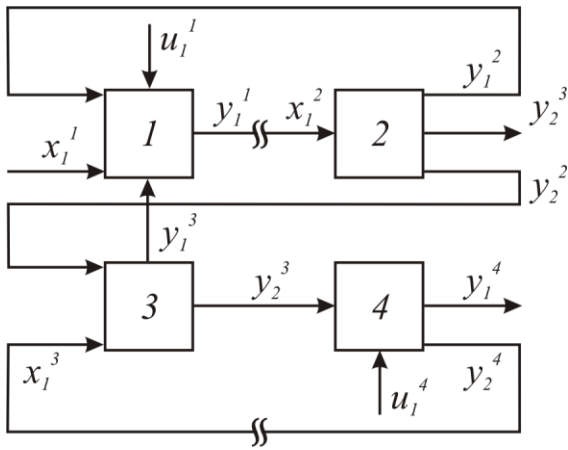


Рис. 2.4. Розімкнута ХТС, що відповідає замкнутій на рис. 2.3, б

$$y_3^2 = f_{11}(x_1^2)$$

Значення x_1^2 і x_1^3 повинні бути задані. Потім елементи розімкнutoї ХТС розраховуються в наступному порядку: 2, 3, 1, 4. При цьому повинні виконуватися умови:

$$\begin{aligned} y_1^1 &= x_1^2; \\ y_2^4 &= x_1^3. \end{aligned}$$

Оскільки при цьому

$$\begin{aligned} y_1^1 &= f_{14}(x_1^2, x_1^3); \\ y_2^4 &= f_{15}(x_1^2, x_1^3), \end{aligned}$$

то

$$\begin{aligned} x_1^2 - f_{14}(x_1^2, x_1^3) &= 0; \\ x_1^3 - f_{15}(x_1^2, x_1^3) &= 0, \end{aligned}$$

що приводить до необхідності вирішувати цю систему нелінійних алгебраїчних рівнянь.

Число розв'язуваних рівнянь дорівнює в загальному випадку сумі параметричностей потоків, що розриваються. Якщо задана точність вирішення не досягнута, то необхідно задати нові, уточнені значення x_1^2 і x_1^3 . Так продовжується доти, поки не буде забезпечена необхідна точність. Це приводить до багаторазового розрахунку розімкнutoї ХТС, що відповідає даній замкнутій. Рішення додаткових рівнянь – це своєрідна «плата» за послідовне рішення рівнянь математичного опису ХТС. Достоїнство даного методу полягає в тому, що він дозволяє розраховувати стаціонарні режими ХТС навіть і тоді, коли окремі її елементи описуються диференціальними рівняннями.

При визначенні місць розриву зв'язків необхідно мати на увазі, що існує звичайно кілька варіантів розриву потоків, що перетворюють замкнуту ХТС у розімкнуту (*рис. 2.5*):

1-й варіант – розрив 3 потоків між елементами (4, 2), (5, 9), (7, 8);

2-й варіант – розрив 2 потоків між елементами (3, 4), (7, 8);

3-й варіант – розрив 3 потоків між елементами (2, 3), (9, 3), (8, 7).

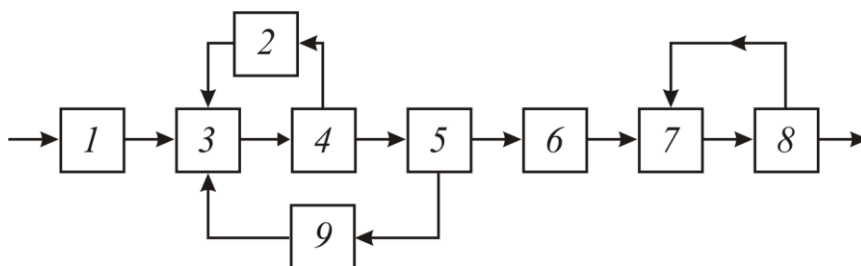


Рис. 2.5. Визначення місць розриву зв'язків ХТС

Припустимо, що параметричність усіх потоків однакова і дорівнює 1. Тоді 1-й варіант приводить до необхідності додатково вирішувати систему з трьох нелінійних алгебраїчних рівнянь, 2-й — систему з двох рівнянь, а 3-й — систему з трьох рівнянь.

У такому випадку перевага віддається 2-му варіанту, тобто кращим варіантом розриву потоків вважається варіант із найменшою сумарною параметричністю потоків, що розриваються. Крім того, як це видно з *рис. 2.5*, спочатку доцільно виділити елементи ХТС, що можуть бути розраховані тільки спільно. Вони відповідають вершинам графа, що входить до складу комплексу. Такими є елементи (2, 3, 4, 5, 9) і (7, 8). Елементи 1 і 6 можуть бути розраховані окремо.

Таким чином, при складанні алгоритмів і програм автоматизованого розрахунку замкнутих ХТС необхідно вирішувати такі основні задачі структурного аналізу:

- виділення сукупностей елементів ХТС, що можуть розраховуватися тільки спільно, тобто виділення комплексів;
- визначення попереднього порядку розрахунку елементів ХТС;
- визначення для кожного комплексу множини дуг, розрив яких перетворить відповідний комплекс у розімкнуту ХТС і яка при цьому має найменшу сумарну параметричність. Таку множину будемо називати оптимально-розриваючою;
- визначення послідовності розрахунку розімкнутого комплексу;
- визначення остаточної послідовності розрахунку ХТС.

Для рішення задач структурного аналізу ХТС відомі відповідні алгоритми, які дозволяють складати програми автоматизованих розрахунків ХТС з різною структурою. Деякі з них розглянуті нижче.

2.3. АЛГОРИТМ ЗНАХОДЖЕННЯ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОЇ ПОСЛІДОВНОСТІ РОЗІМКНУТОЇ СИСТЕМИ

В основі алгоритму перебування ОПРС лежить наступне правило: *елемент може бути включений до складу ОПРС, якщо відомі усі вхідні в нього потоки*. Розглянемо алгоритм визначення ОПРС на основі В-таблиці зв'язків.

Початкова інформація:

- число елементів ХТС — N ;
- число невідомих вхідних потоків для кожного елемента ХТС — $A(I), I = 1, 2, \dots, N$;
- сумарне число невідомих вхідних потоків для елементів ХТС — N_{CB} ;
- номери елементів ХТС, з яких надходять невідомі потоки $D(I), I = 1, 2, \dots, N_{CB}$.

В основі алгоритму лежать наступні операції:

1. Відшукується k -й рядок В-таблиці, зв'язків, для якої $A(I) = 0$;
2. Номер цього рядка заноситься у ОПРС;
3. Зменшується на одиницю число *невідомих* входів для елементів, у які надходить потік з k -го елемента;
4. Якщо число елементів, включених у ОПРС, дорівнює N , то робота закінчується, інакше операції продовжуються з п. 1.

У результаті роботи алгоритму одержуємо множину вершин S , що утворюють ОПРС. У *табл. 2.5* представлена послідовність перетворення В-таблиці зв'язків відповідно до розглянутого алгоритму для ХТС, зображеної на *рис. 2.2*.

Таблиця 2.5

Послідовність перетворення В-таблиці зв'язків при формуванні ОПРС

Вершина графа	Негативно-інцидентні вершини	Число невідомих входів в елемент на k -ому кроці роботи алгоритму							
		0	1	2	3	4	5	6	7
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	5	1	1	1	0	0	0	0	0
3	2	1	1	1	1	0	0	0	0
4	0, 1	1	0	0	0	0	0	0	0
5	4	1	1	0	0	0	0	0	0
6	5, 8	2	2	2	1	1	1	0	0
7	3, 6	2	2	2	2	2	1	1	0
8	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Примітка. Надалі при структурному аналізі фіктивна нульова вершина опускається, оскільки вона відображає лише зовнішні зв'язки ХТС, що несуттєві.

Таким чином, *обчислювальна послідовність* розглянутої ХТС має вигляд: **1, 4, 5, 2, 3, 8, 6, 7.**

Приведемо ще приклад використання алгоритму перебування ОПРС (рис. 2.6).

Початкова інформація:

$N = 7;$ $A = (0, 1, 2, 2, 1, 1, 2);$

$N_{CB} = 9;$ $D = (1, 1, 2, 3, 6, 1, 5, 6, 5).$

Результати розрахунків:

ОПРС (1, 2, 3, 5, 6, 4, 7).

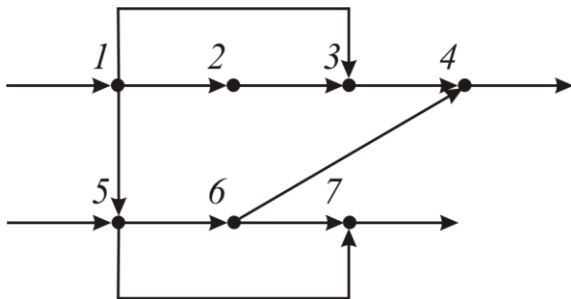
2.4. АЛГОРИТМИ СТРУКТУРНОГО АНАЛІЗУ ЗАМКНУТИХ ХТС

2.4.1. Виділення комплексів на графі

В основі одного з перших алгоритмів виділення комплексів лежать операції з матрицею зв'язків **A** з метою виділення на графі ХТС шляхів різної довжини і побудови матриці комплексів. Відомі й інші матричні алгоритми.

Розглянемо алгоритм із використанням матриці шляхів на графі. Така матриця є квадратною і містить стільки стовпців, скільки елементів мається в складі ХТС. Якщо на графі є шлях будь-якої довжини з вершини *i* у вершину *j*, то на перетинанні *i*-го рядка та *j*-го стовпця матриці шляхів ставиться 1, а в протилежному випадку – 0. Матриця шляхів графа ХТС, представленого на рис.

2.5, приведена у *табл. 2.6*. Позначимо цю матрицю буквою **P**.



Таблиця 2.6

Матриця шляхів P на графі

Рис. 2.6. Граф розімкнутої ХТС

<i>I</i>	<i>J</i>								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2		1	1	1	1	1	1	1	1
3		1	1	1	1	1	1	1	1
4		1	1	1	1	1	1	1	1
5		1	1	1	1	1	1	1	1
6						1	1	1	
7							1	1	
8							1	1	
9		1	1	1	1	1	1	1	1

У матриці шляхів **P** на графі на головній діагоналі цієї матриці стоять одиниці, тому що вважається, що шлях довжиною 0 з будь-якого елемента в цей же самий елемент завжди існує.

Поряд з матрицею **P** будується допоміжна матриця **S** за наступним правилом (*табл. 2.7*):

$$S_{ij} = 1, \text{ якщо } P_{ij} = P_{ji} = 1 \text{ і } S_{ij} = 0 \text{ у протилежному випадку.}$$

Таблиця 2.7

Допоміжна матриця S

<i>I</i>	<i>J</i>								
	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1	1								
2		1	1	1	1				1
3		1	1	1	1				1
4		1	1	1	1				1
5		1	1	1	1				1
6						1			
7							1	1	
8							1	1	
9		1	1	1	1				1

За допомогою матриці **S** визначаються комплекси, що входять до складу графа ХТС. Якщо в *i*-му рядку цієї матриці є тільки один ненульовий елемент S_{ii} (приналежний головній діагоналі), то елемент ХТС із номером *i* може бути розрахований окремо від інших елементів системи. У розглянутому прикладі це елементи 1 і 6.

Рядки матриці **S**, що мають, крім елемента S_{ii} , інші ненульові елементи, відповідають комплексам. Ненульові елементи рядків указують вершини графа, що входять до складу комплексу.

У нашому прикладі, відповідно до матриці **S** (див. *табл. 2.7*), до складу ХТС входять два комплекси:

- комплекс 1 = (2, 3, 4, 5, 9);
- комплекс 2 = (7, 8).

Однакові рядки матриці відповідають першому і другому комплексам.

Розглянутий алгоритм виділення комплексів вимагає витрат ручної праці для побудови матриць **P** і **S**. У цьому полягає його недолік. Тому для автоматизованого рішення задач структурного аналізу ХТС використовують більш досконалі алгоритми. Зупинимося на деяких з них.

Розглянемо три будь-які вершини графа ХТС: *i*, *j*, *m*. Якщо існує шлях (будь-якої довжини) з вершини *i* у вершину *j* і з вершини *j* у *i*, то ці вершини належать тому самому комплексу **K**. Для приєднання вершини *m* до комплексу необхідно проаналізувати, чи є шлях з будь-якої вершини, (наприклад, *i*), що належить комплексу **K**, у вершину *m* і зворотний шлях з вершини *m* у будь-яку

вершину комплексу \mathbf{K} (наприклад, i). Якщо ці два шляхи існують, то вершина m належить комплексу \mathbf{K} .

Застосування цього правила до ХТС, зображеної на *рис. 2.5*, дозволяє виділити наступні комплекси:

- елемент 1 – вироджений комплекс K_1 ;
- (2, 3, 4, 5, 9) – комплекс K_2 ;
- елемент 6 – вироджений комплекс K_3 ;
- (7, 8) – комплекс K_4 .

Аналогічно можна виділити комплекси в складі більш складної ХТС, представленої на *рис. 2.7*:

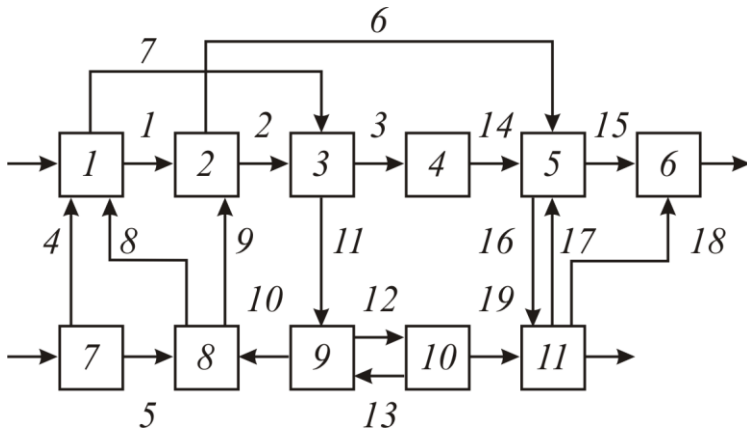


Рис. 2.7. Граф замкнутої ХТС

- (1, 2, 3, 8, 9, 10) – комплекс K_1 ;
- (5, 11) – комплекс K_2 ;
- елементи 6, 7, 4 розраховуються автономно.

Комплекси в складі ХТС можливо також виділити з використанням матриці суміжності.

Даний метод вимагає обчислення ступенів матриці суміжності $[A]$ шляхом її послідовного множення на

«себе» (з використанням Булевої алгебри). Коли n -а ступінь матриці суміжності отримана послідовним множенням на саму себе, то можна довести, що в n -ому ступені матриці $[A]$, як і у початковій матриці, одиниця на перетинанні i -ого рядка і j -го стовпця означає, що існує, принаймні, один шлях через n потоків, від блоку i до блоку j .

Для спрощення і зменшення кількості розрахунків можна спростити матрицю суміжності. Якщо в будь-якому стовпці (рядку) стоять одні нулі, тоді розглянутий блок може бути виділений зі схеми для наступного розгляду і вилучений з початкової матриці суміжності шляхом викреслювання відповідних стовпця і рядка. В результаті перетворень початкова матриця суміжності перетвориться в матрицю, де всі блоки входять або в комплекси, або є незалежними блоками між комплексами.

Якщо утворити Булеву суму всіх ступенів матриці суміжності, то її елемент буде дорівнювати 1, якщо дорівнює 1 хоча б один відповідний елемент цієї матриці. Таким способом одержують матрицю досяжності R_n . Дана матриця містить інформацію про шляхи від блоку i до блоку j . Якщо транспонувати матрицю досяжності, тобто поміняти зв'язку від блоку j до блоку i , то нова матриця $R_n^{(T)}$ подає інформацію про зв'язки між j і i блоками. При накладанні матриці R_n на $R_n^{(T)}$ одиниця зберігається тільки там, де вона була у R_n і $R_n^{(T)}$. Ця операція називається суперпозицією. Результат суперпозиції, названий перетинанням, можна записати таким способом $\mathbf{W} = R_n \cap R_n^{(T)}$.

Якщо елемент W_{ij} дорівнює 1, це означає, що існує зв'язок між блоками i і j в обох напрямках, а такий зв'язок може існувати тільки у випадку комплексу. Це буде виключати будь-який блок, що не входить до складу жодного комплексу, а будь-який ненульовий рядок у суперпозиції буде містити в собі всі блоки одного незалежного комплексу.

Виділення комплексів дозволяє вирішувати задачу визначення ППРС – попередньої послідовності розрахунку замкнутої ХТС. Так, для розглянутих систем маємо наступні ППРС:

- ХТС, представлена на *рис. 2.5*: ППРС – [1, K_1 , 6, K_2];
- ХТС, представлена на *рис. 2.7*: ППРС – [7, K_1 , 4, K_2 , 6].

Задача визначення *оптимальної множини дуг*, що розриваються, вирішується в два етапи. На першому визначають усі контури, що входять у комплекси, а на другому відшуковують дуги, розірвавши які можна розірвати всі контури. При цьому *сумарна параметричність* дуг, що розриваються, повинна бути *мінімальною*.

2.4.2. Виділення контурів, що входять до складу комплексу

Про число контурів у сильно зв'язаному графі можна судити за наступними даними, що показують максимально можливе число контурів N_K у складі графа, який містить N вершин:

N	2	4	5	6	9	11
N_K	2	21	84	394	125664	10976008

Алгоритми виділення контурів, що входять до складу комплексу, передбачають побудову так званого прадерева комплексу.

Прадеревом комплексу з коренем K будемо називати таке зображення усіх шляхів, існуючих у комплексі, коли у кожну вершину, що відрізняється від K , входить тільки одна дуга. У вершину K не входить жодна дуга.

Для виділення контурів, що входять у комплекс, доцільно побудувати A -таблицю внутрішніх зв'язків для вершин, що входять у комплекс. Після цього будується прадерево комплексу. Приводимо A -таблицю зв'язків комплексу (1, 2, 3, 8, 9, 10), що входить до складу ХТС, представленої на *рис. 2.7 (табл. 2.8)*.

Таблиця 2.8

A -таблиця зв'язків комплексу (1, 2, 3, 8, 9, 10)

Вершина комплексу	Позитивно інцидентні вершини	Вершина комплексу	Позитивно інцидентні вершини
1	2, 3	8	1, 2
2	3	9	10, 8
3	9	10	9

Нижче приведена A -таблиця зв'язків комплексу (2, 3, 4, 5, 9), що входить до складу ХТС, представленої на *рис. 2.5 (табл. 2.9)*.

А-таблиця зв'язків комплексу (2, 3, 4, 5, 9)

Вершина комплексу	Позитивно інцидентні вершини	Вершина комплексу	Позитивно інцидентні вершини
2	3	5	9
3	4	9	3
4	2, 5		

Для побудови прадерева з будь-якої вершини комплексу, що приймають за корінь прадерева, будують усі шляхи, що існують у комплексі. Кожен шлях будують доти, поки не зустрінеться вже наявна на цьому шляху вершина. На цьому побудова гілки прадерева закінчується. Кінцева вершина гілки прадерева називається висячою. Кількість висячих вершин відповідає кількості контурів. На *рис. 2.8* показано прадерево комплексів (1, 2, 3, 8, 9, 10) і (2, 3, 4, 5, 9) (див. вище відповідні А-таблиці).

Ділянки гілок прадерева між повторюваними вершинами є контурами, що входять до складу комплексу. Нижче приведені контури, що входять до складу розглянутих комплексів (*табл. 2.10 і 2.11*).

Недолік розглянутого алгоритму виділення контурів полягає в тому, що іноді ті самі контури виділяються кілька разів. Так, у першому випадку контури I і IV, а також III і VI однакові. Тому необхідно проаналізувати виділені контури і виключити ті, що повторюються.

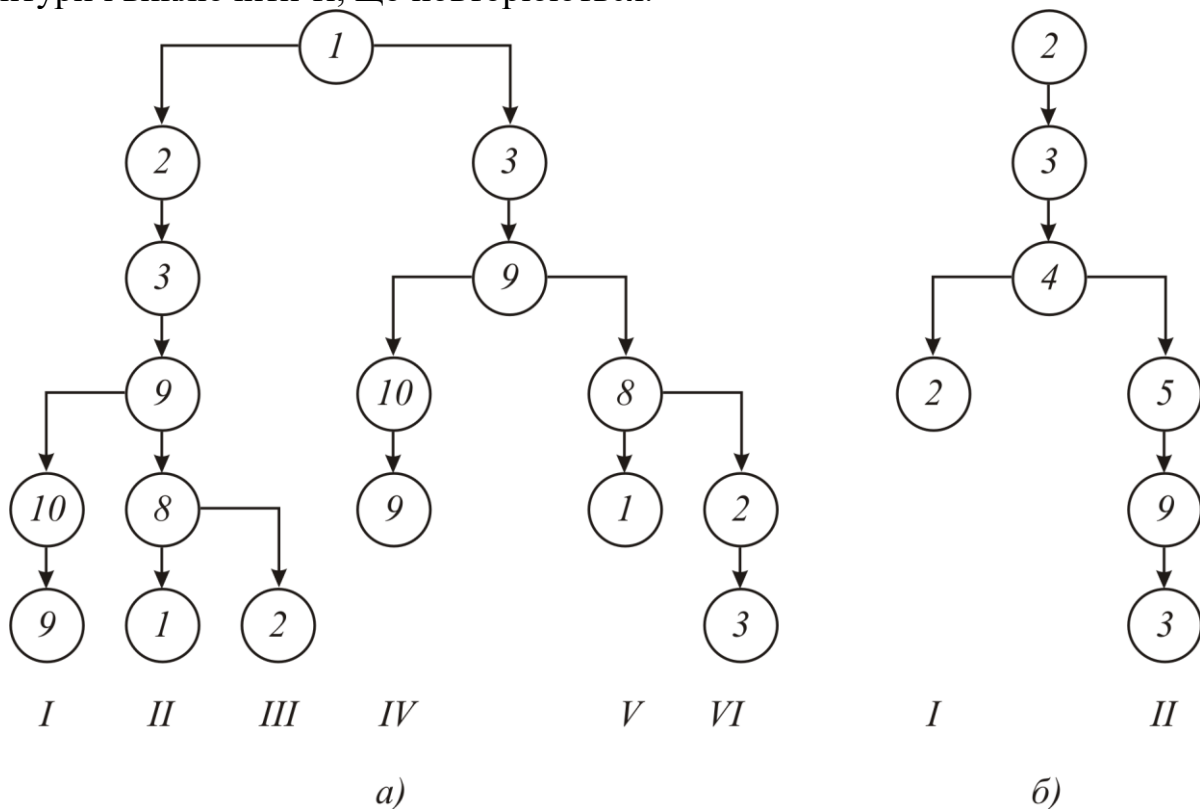


Рис. 2.8. Виділення контурів: *а* — комплекс (1, 2, 3, 8, 9, 10); *б* — комплекс (2, 3, 4, 5, 9). Римськими цифрами відзначені висячі вершини прадерева

Таблиця 2.10

Контури, що входять до складу комплексу (1, 2, 3, 8, 9, 10)

Висяча вершина прадерева	Контур	Висяча вершина прадерева	Контур
I	9-10-9	IV	9-10-9
II	1-2-3-9-8-1	V	1-3-9-8-1
III	2-3-9-8-2	VI	3-9-8-2-3

Таблиця 2.11

Контури, що входять до складу комплексу (2, 3, 4, 5, 9)

Висяча вершина прадерева	Контур
I	2-3-4-2
II	3-4-5-9-3

2.4.3. Знаходження оптимально-розриваючої множини дуг

Задача знаходження оптимально-розриваючої множини дуг (ОРМД) досить складна. Час, необхідний для строгого рішення цієї задачі, експоненційно зростає зі збільшенням складності системи. А так як навіть не дуже складні ХТС можуть містити десятки і сотні контурів, то використовують різні спрощення методів рішення цієї задачі, що дають у більшості випадків оптимальні РМД або ті, що небагато від них різняться.

Усе різноманіття методів рішення поставленої задачі можна розбити на дві групи: перша група методів заснована на використанні для цієї мети матриці контурів і, отже, вимагає виділення контурів; друга група — це так звані евристичні методи; вони засновані на застосуванні різного роду евристик.

Розглянемо приклад використання методів першої групи. Раніше для ХТС (див. *рис. 2.7*) нами були виділені: комплекс (5, 11), що складається з одного контуру 5—11—5, і комплекс (1, 2, 3, 8, 9, 10), що складається з 4 контурів. Список контурів можна записувати як по вершинах, так і по дугах, що з'єднують ці вершини (номери дуг позначені на *рис. 2.7*).

Список контурів, записаний
по вершинах

- 1 9—10—9;
- 2 1—2—3—9—8—1;
- 3 2—3—9—8—2;
- 4 1—3—9—8—1—4

Список контурів, записаний
по дугах

- 1 12—13;
- 2 1—2—11—10—8;
- 3 2—11—10—9;
- 4 7—11—10—8.

Побудуємо матрицю контурів комплексу (1, 2, 3, 8, 9, 10) (*табл. 2.12*), елементи якої $K_{i,j}$ (i — номер контуру, j — номер дуги) визначаються таким чином

$K_{ij} = 1$, якщо дуга j входить у контур i , $K_{ij} = 0$ – у противному випадку.

Таблиця 2.12

Матриця контурів, що входять до складу комплексу (1, 2, 3, 8, 9, 10)

i / j	1	2	7	8	9	10	11	12	13
1	0	0	0	0	0	0	0	1	1
2	1	1	0	1	0	1	1	0	0
3	0	1	0	0	1	1	1	0	0
4	0	0	1	1	0	1	1	0	0
F	1	2	1	2	1	3	3	1	1
P	4	6	3	6	4	9	8	5	7

Знайдемо контурний ступінь F , що дорівнює числу контурів, у які входить дана дуга (сума по стовпцях). Чим більше буде величина F , тим більше контурів буде розірвано при розриві цієї дуги. Однак, якщо контурний ступінь двох чи більше дуг буде однаковим, причому ці дуги входять у ті самі контури, то необхідно враховувати параметричність кожної дуги P (параметричність дуги обумовлює число параметрів, що характеризують дану дугу – технологічний потік). І розривати треба ту дугу, що має найменше значення P . Нехай параметричність дуг має значення, приведені в *табл. 2.12*.

З матриці контурів видно, що максимальне значення F мають дуги 10 і 11, однак менша параметричність у дуги 11. Розрив цієї дуги приводить до розриву контурів 2, 3, 4. Викреслюємо їх з матриці контурів і для контурів, що залишилися, знову обумовлюємо контурний ступінь (*табл. 2.13*)

Таблиця 2.13

Матриця контурів, що входять до складу комплексу (1, 2, 3, 8, 9, 10)

i / j	1	2	7	8	9	10	11	12	13
1	0	0	0	0	0	0	0	1	1
F								1	1
P								5	7

З двох дуг 12 і 13 при рівному контурному ступені менша параметричність у дуги 12. Таким чином, для розриву всіх контурів комплексу (1, 2, 3, 8, 9, 10) необхідно розірвати дуги 11 і 12.

Аналогічно необхідно визначити ОРМД для комплексу (5, 11).

Після перебування ОРМД визначають послідовність розрахунку кожного комплексу й остаточну послідовність розрахунку ХТС. При цьому в кожен комплекс вводиться *фіктивний*, так званий *ітераційний блок*. Передбачається, що в цих блоках задаються початкові наближення значень параметрів розірваних потоків.

З аналізу структури ХТС, приведеної на *рис. 2.7*, випливає, що попередня послідовність розрахунку даної ХТС може бути записана як

$$[7, K1, 4, K2, 6]$$

Для розриву комплексу $K1$ обрані дуги 11 і 12, а для комплексу $K2$ – дуга

16. Тоді інформаційна схема розрахунку ХТС буде мати вигляд (рис. 2.9).

Для визначення заключної послідовності розрахунку ХТС (ЗПРС) необхідно знайти ОПРС кожного комплексу після включення в нього фіктивного блоку. Для цього використовуємо алгоритм із використанням В-таблиці зв'язків.

Розглянемо комплекс (1, 2, 3, 8, 9, 10, ІБ1). Результати визначення для нього ОПРС приведені в табл. 2.14.

Таблиця 2.14

Визначення ОПРС для комплексу (1, 2, 3, 8, 9, 10, ІБ1)

Вершина графа	Негативно інцидентні вершини	Число невідомих входів в елемент на k -ому кроці роботи алгоритму					
		0	1	2	3	4	5
1	8	1	1	1	0	0	0
2	1, 8	2	2	2	1	0	0
3	1, 2	2	2	2	2	1	0
8	9	1	1	0	0	0	0
9	ІБ1, 10	1	0	0	0	0	0
10	ІБ1	0	0	0	0	0	0

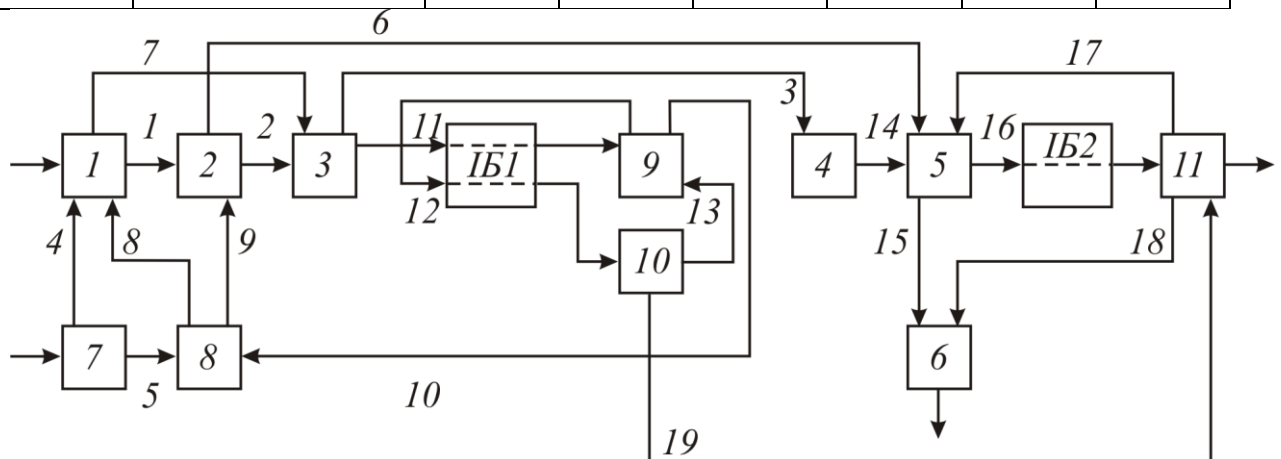


Рис. 2.9 Інформаційна схема розрахунку ХТС

ОПРС (ІБ1, 10, 9, 8, 1, 2, 3)

Аналогічно для комплексу (5, 11) ОПРС (ІБ2, 11, 5).

Тоді заключна послідовність розрахунку ХТС набуде вигляду:

[7, (ІБ1, 10, 9, 8, 1, 2, 3), 4, (ІБ2, 11, 5), 6].

Цю послідовність розрахунків можна розшифрувати так:

- спочатку розраховується блок 7;
- проводиться розрахунок параметрів комплексу 1. Для цього використовується ітераційна процедура. Задаються параметри потоків на виході з ітераційного блоку 1. За знайденою послідовністю проводиться розрахунок комплексу. Знайдені значення потоків на вході в ітераційний блок 1 порівнюються з заданими вихідними значеннями. Якщо розбіжність

між ними менше припустимої, то ітераційна процедура закінчується. Інакше уточнюються параметри потоків на виході з ітераційного блоку, і процедура повторюється;

- розраховується блок 4;
- аналогічно розрахунку комплексу 1 проводиться розрахунок комплексу 2;
- розраховується блок 6.

Алгоритм складання ОПРС заключної послідовності дозволяє скласти блок аналізу структури ХТС програми автоматизованих розрахунків схем з будь-якою структурою.

2.5. ПРИКЛАДИ ЗАДАЧ

2.5.1. Визначення обчислювальної послідовності розімкнутої системи

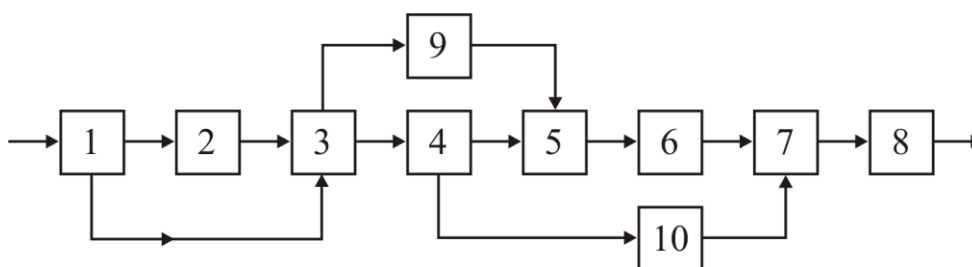
ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Представити структуру ХТС із використанням різних способів та визначити обчислювальну послідовність розрахунку схеми; скласти алгоритм автоматизованого аналізу структури системи.

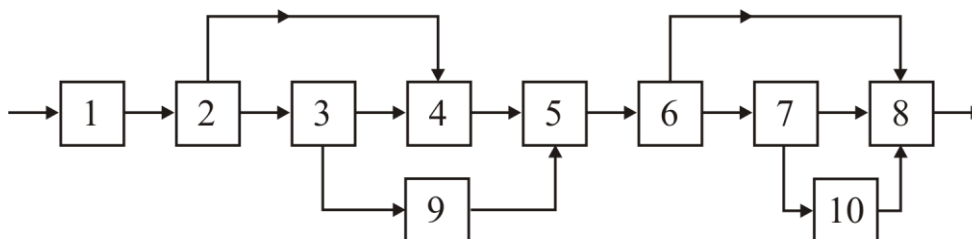
НАВЧАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

1. Для заданої ХТС скласти параметричний потоковий граф із указівкою зовнішнього середовища. На графі позначити номери вершин і номери дуг.
2. Для заданої ХТС скласти матрицю суміжності, список зв'язків, А– і В–таблиці зв'язків, NA– і NB–таблиці зв'язків.
3. Визначити обчислювальну послідовність розрахунку системи.

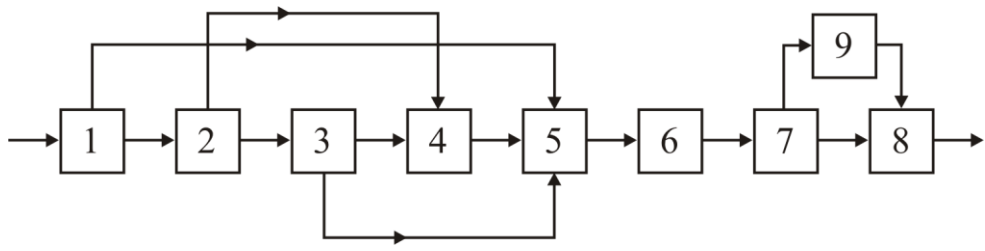
1)



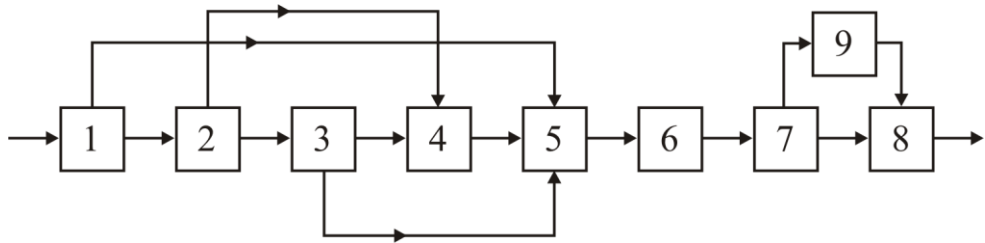
2)



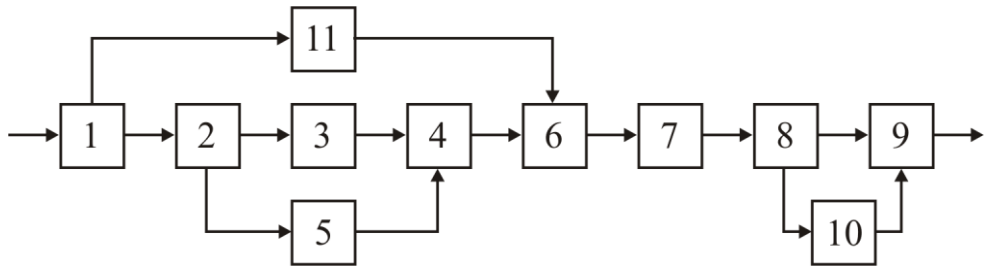
3)



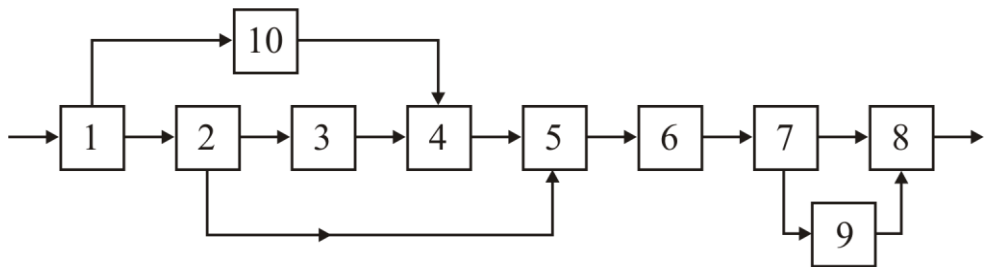
4)



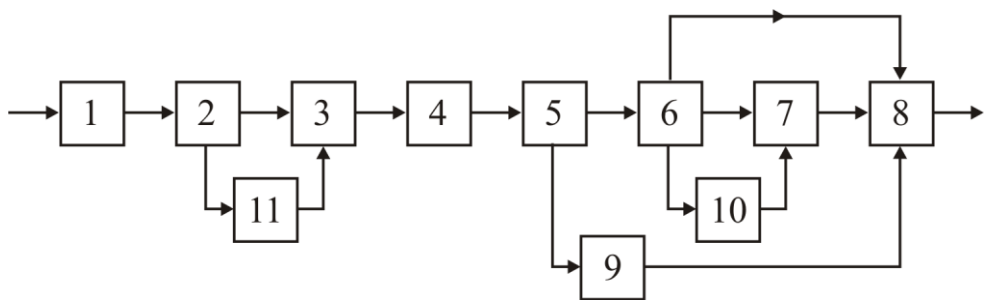
5)



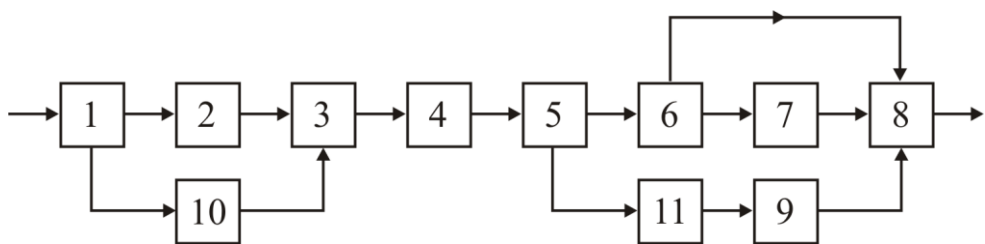
6)



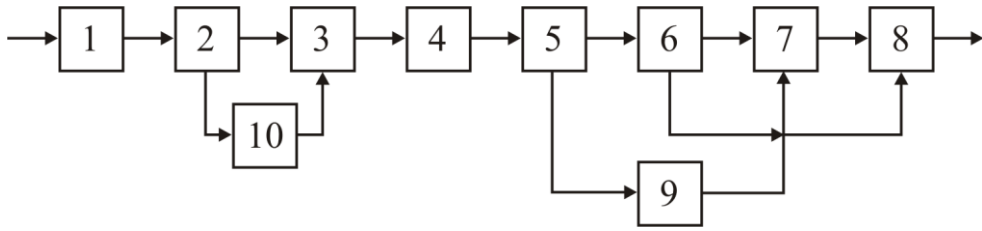
7)



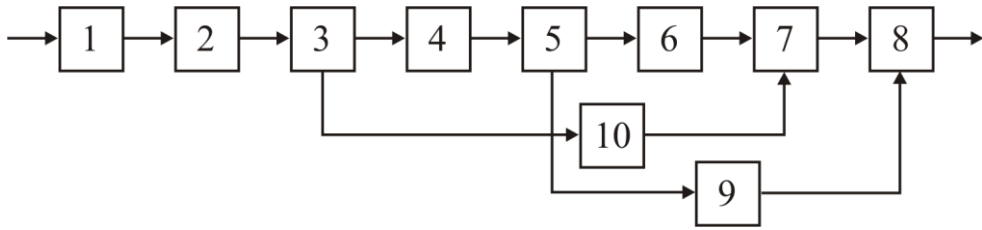
8)



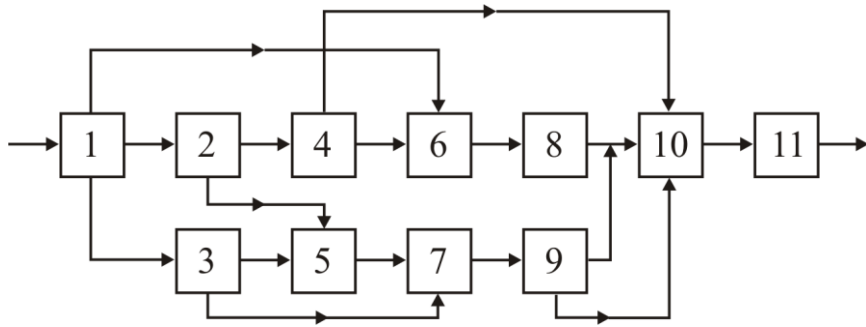
9)



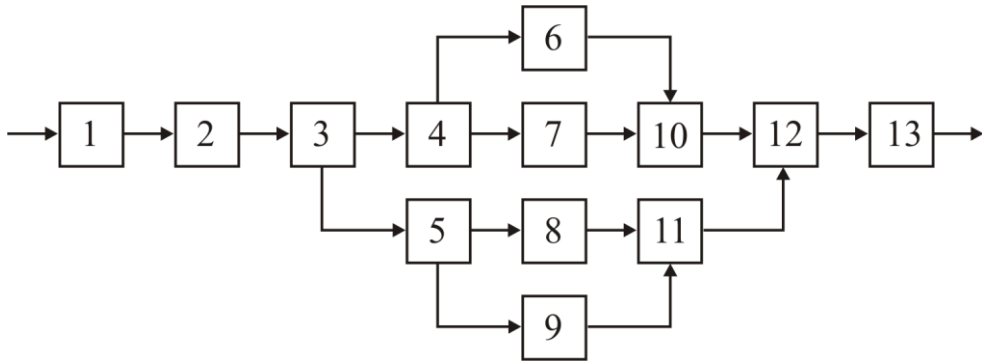
10)



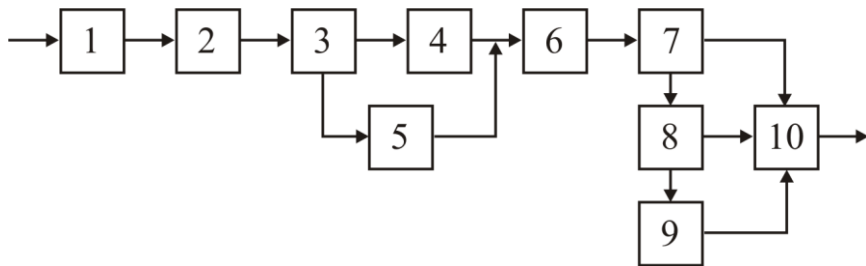
11)



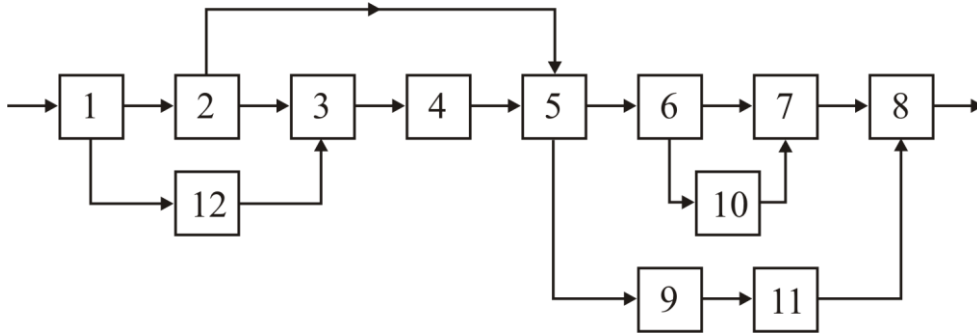
12)



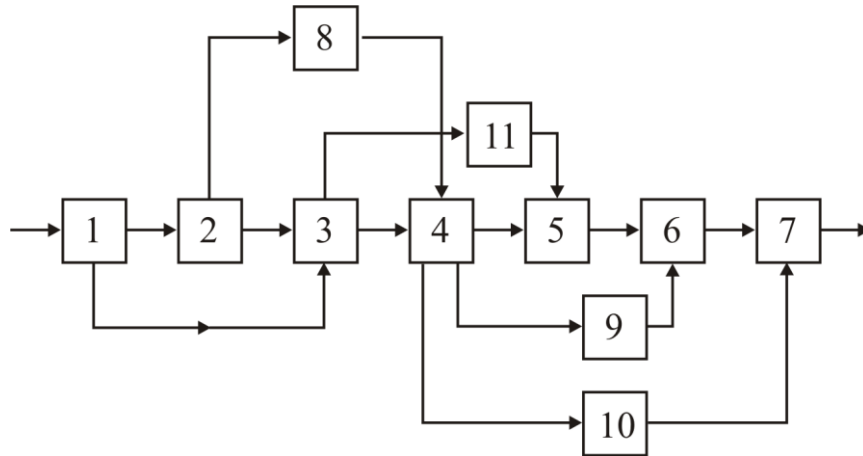
13)



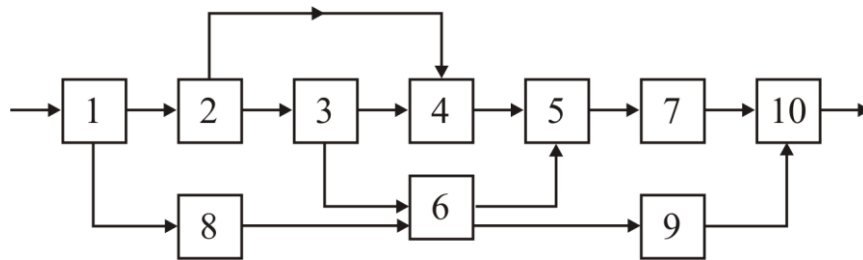
14)



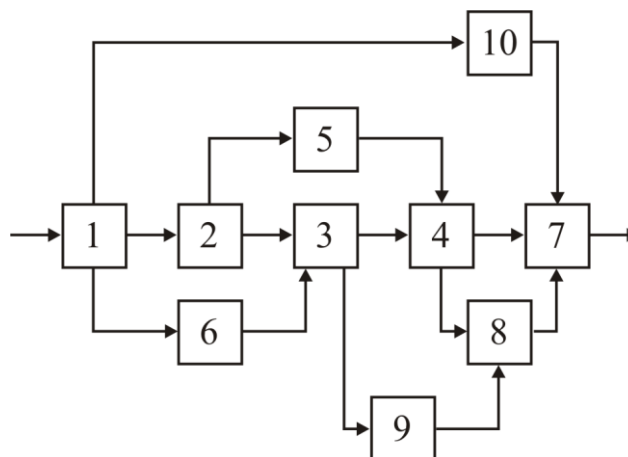
15)



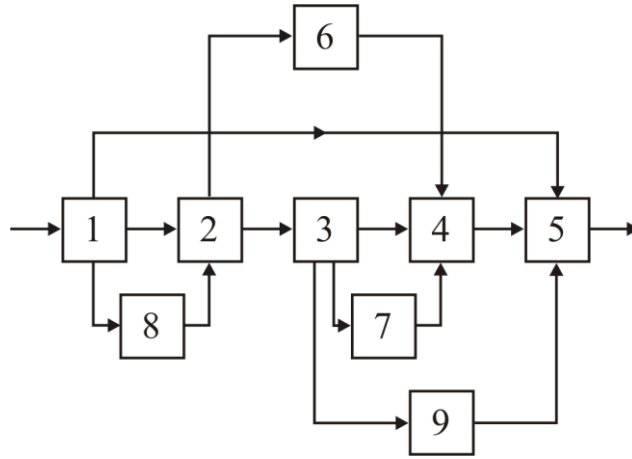
16)



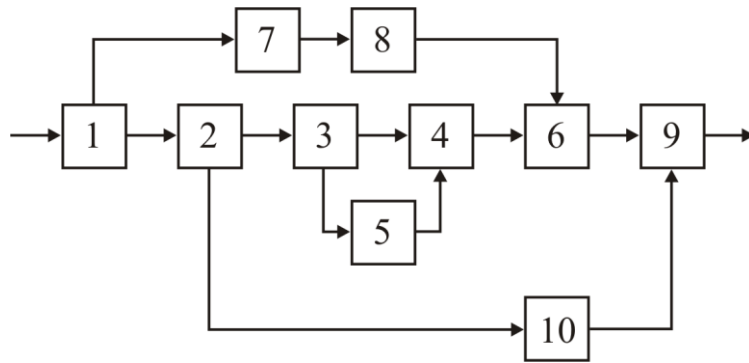
17)



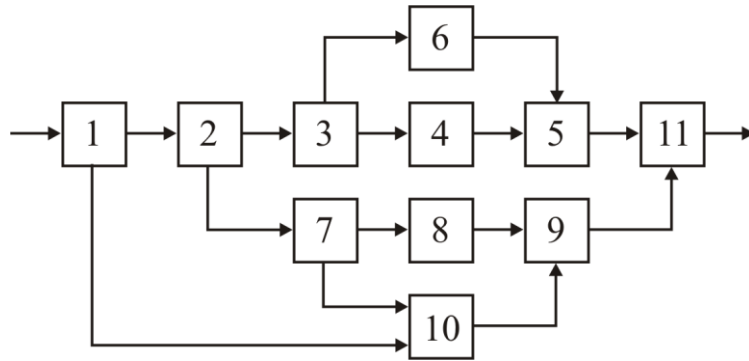
18)



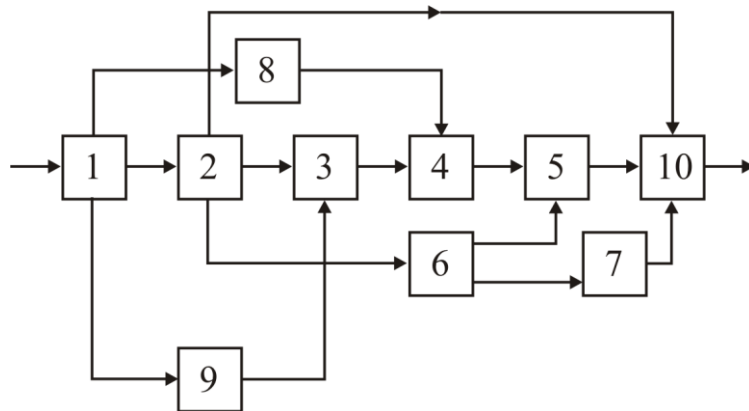
19)



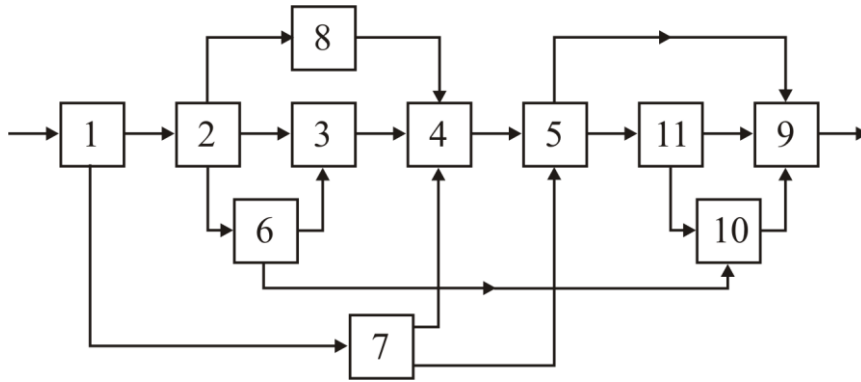
20)



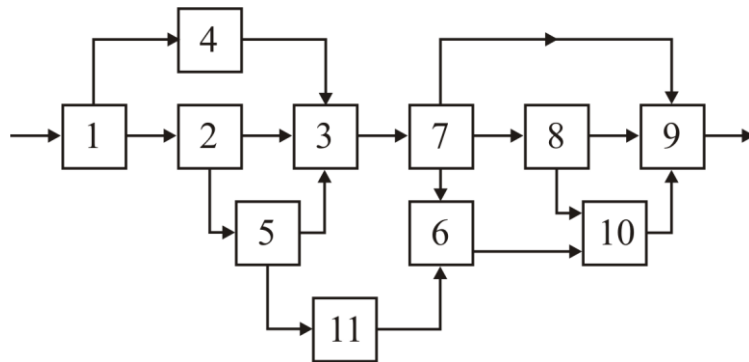
21)



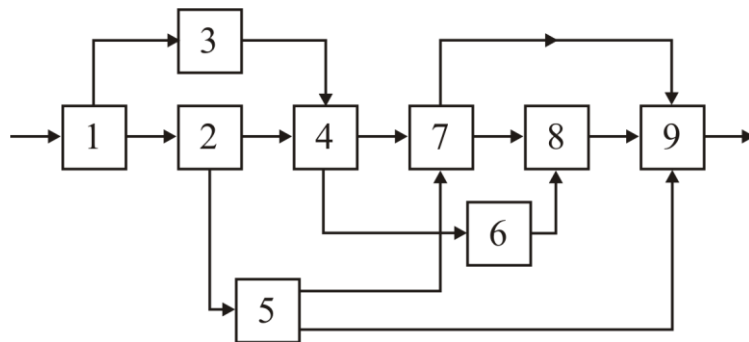
22)



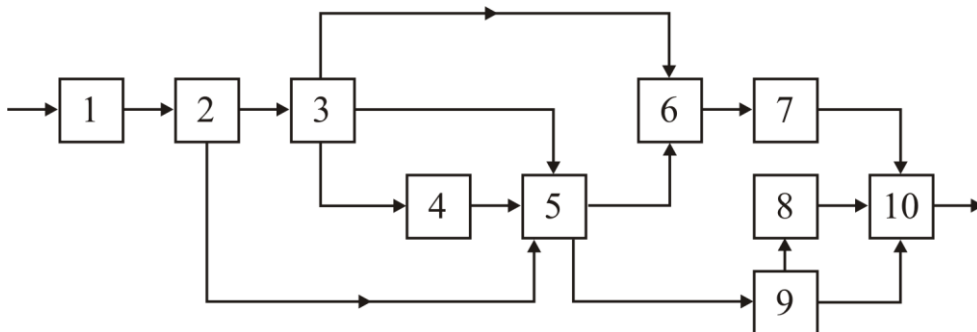
23)



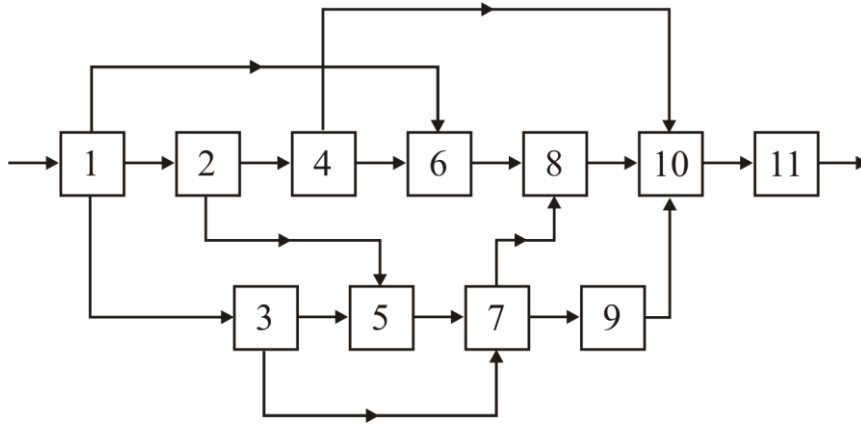
24)



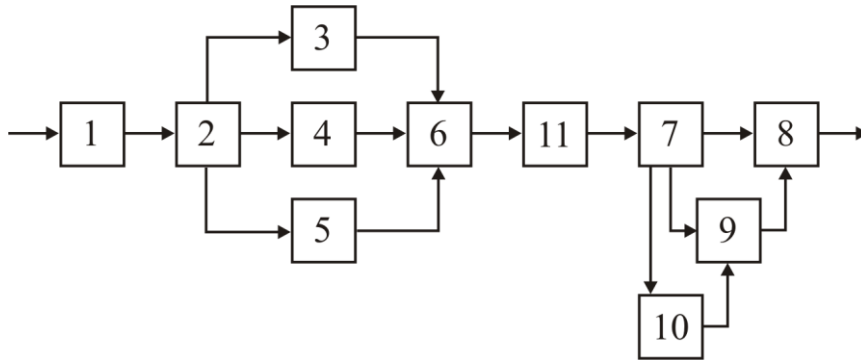
25)



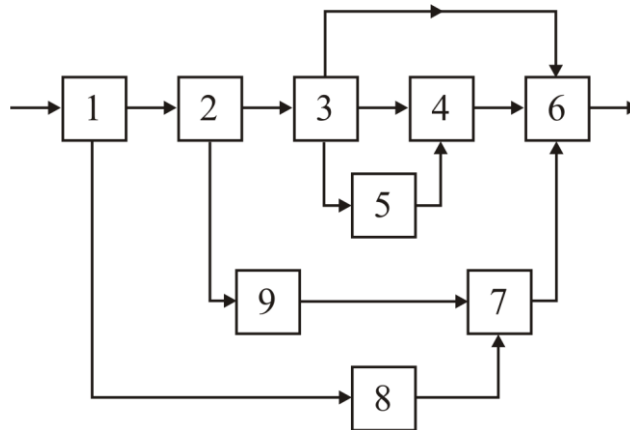
26)



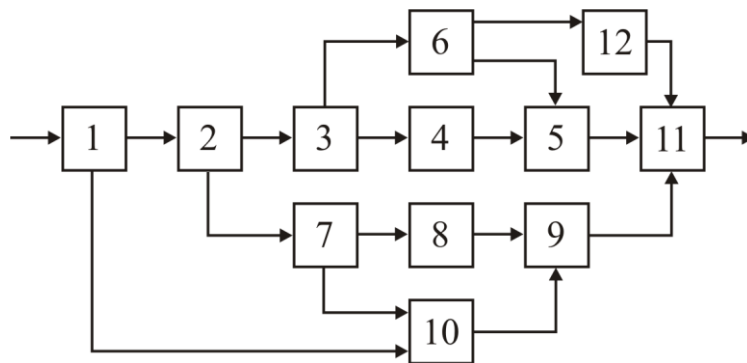
27)



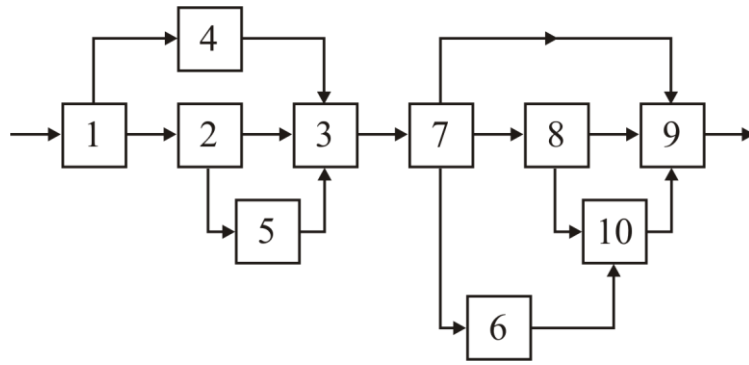
28)



29)



30)



2.5.2. Аналіз структури ХТС

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Визначити і виділити комплекси ХТС, визначити попередню послідовність розрахунку схеми, знайти оптимальну множину потоків, що розриваються, і послідовність розрахунку кожного комплексу та визначити остаточну послідовність розрахунку для заданої ХТС; скласти алгоритм автоматизованого аналізу структури системи.

НАВЧАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

1. Виділити комплекси на графі за допомогою алгоритму, що використовує матрицю шляхів і допоміжну матрицю.
2. Виділити комплекси на графі за допомогою алгоритму, що використовує матрицю суміжності. Для цього:
 - спростити (при необхідності) вихідну матрицю суміжності;
 - використовуючи програму «MATRIZ.EXE», знайти матрицю досяжності, транспоновану матрицю досяжності і суперпозицію і виділити комплекси. Блок-схема програми «MATRIZ.EXE» представлена на **рис. 2.10**.

Пояснення до блок-схеми:

- 1 – початок;
 2 – завдання початкових даних: N – розмірність матриці суміжності, A – початкова матриця суміжності;
 3 – печатка початкових даних;
 4, 5 – обчислення ступенів матриці суміжності;

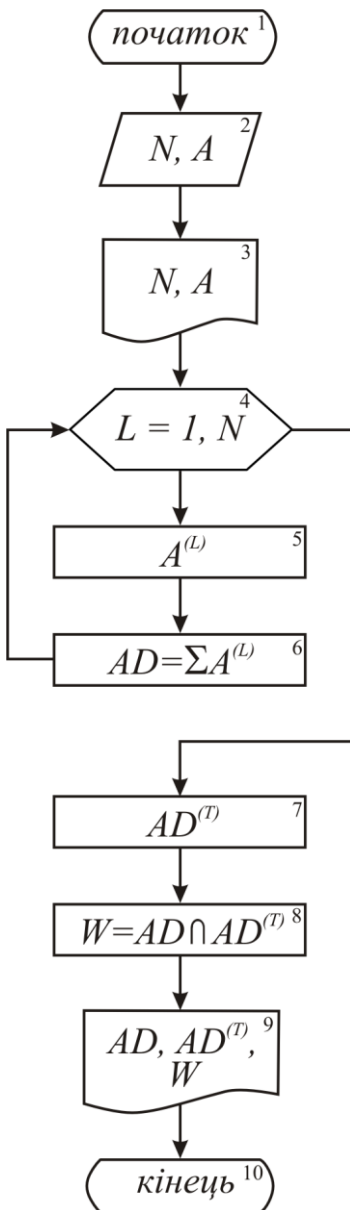
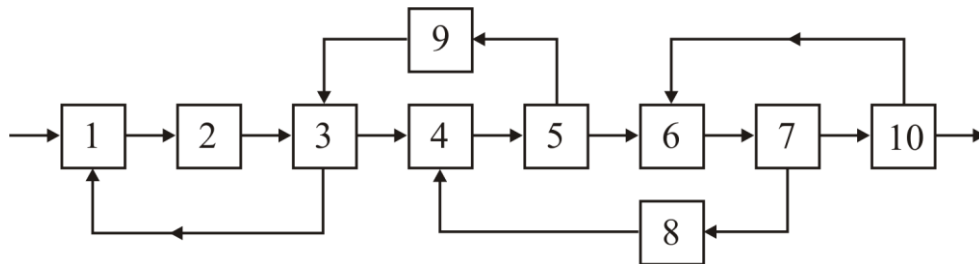


Рис. 2.10. Блок-схема програми «MATRIZ.EXE»

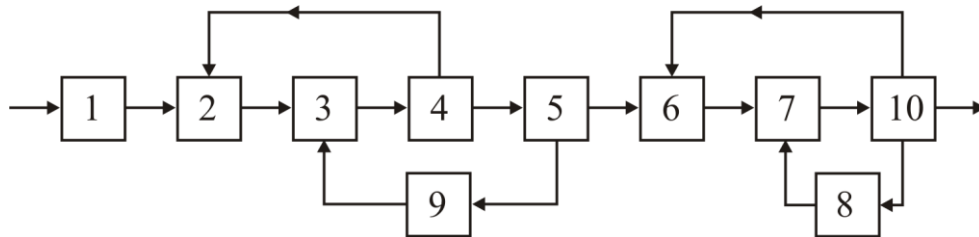
- 6 – знаходження матриці досяжності AD ;
- 7 – визначення транспонованої матриці досяжності $AD^{(T)}$;
- 8 – обчислення суперпозиції матриці досяжності і транспонованої матриці досяжності W ;
- 9 – печатка отриманих результатів;
- 10 – кінець обчислень.

3. Зіставити результати, отримані за допомогою різних алгоритмів.
4. Визначити попередню послідовність розрахунку схеми.
5. Виділити контури, що входять до складу кожного комплексу. Для цього:
 - побудувати праделерево комплексу;
 - проаналізувати отримані контури і виключити повторювані;
 - скласти списки контурів, записаних по вершинах і по дугах.
6. Знайти оптимально-розриваючі множини дуг, використовуючи матрицю контурів.
7. У кожному комплексі визначити обчислювальну послідовність розрахунку комплексу, включивши в інформаційну схему фіктивні блоки.
8. Визначити остаточну послідовність розрахунку системи.

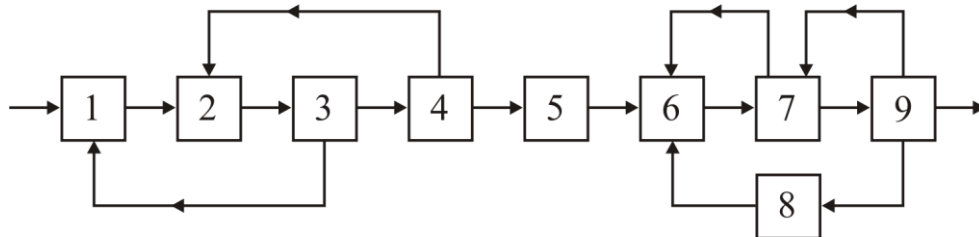
1)



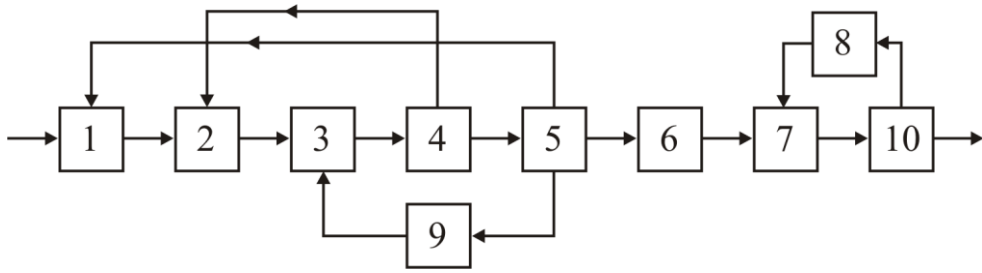
2)



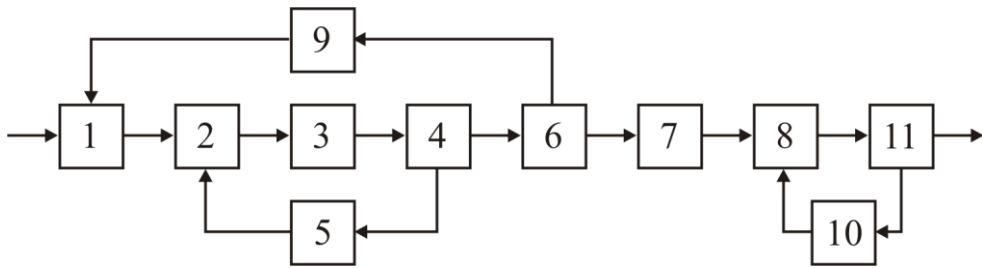
3)



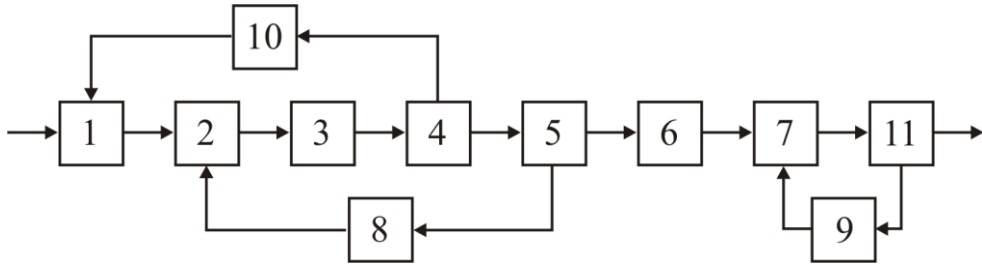
4)



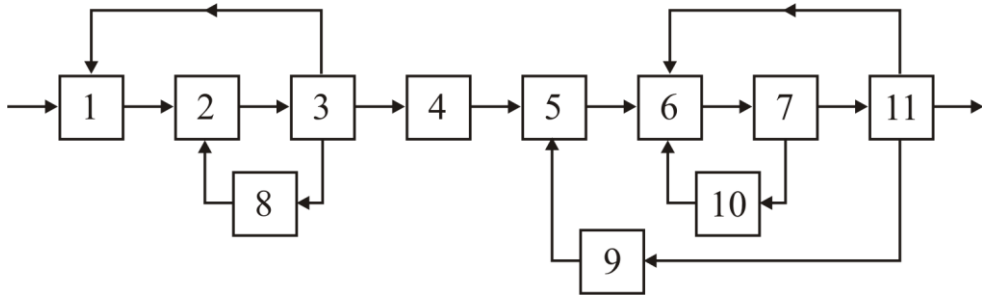
5)



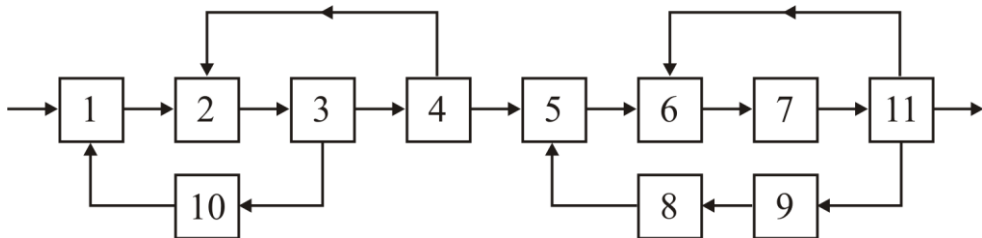
6)



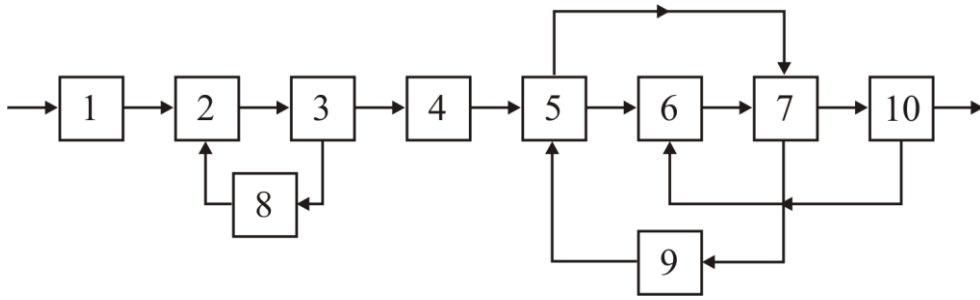
7)



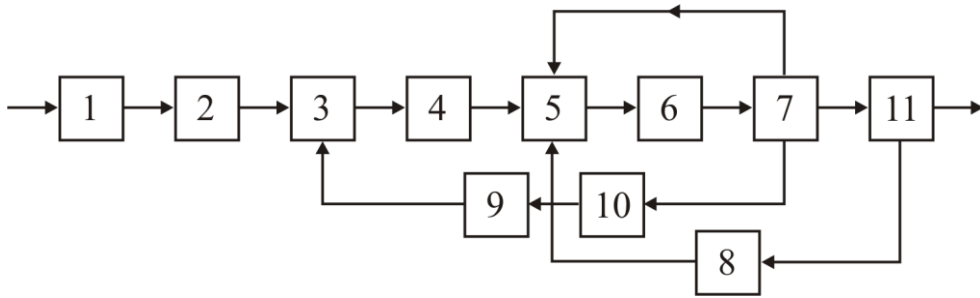
8)



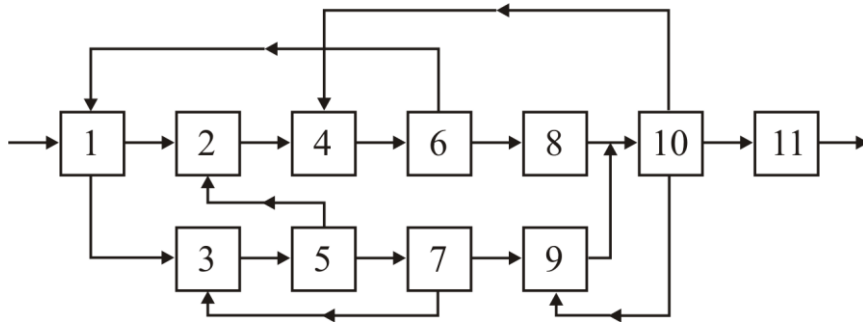
9)



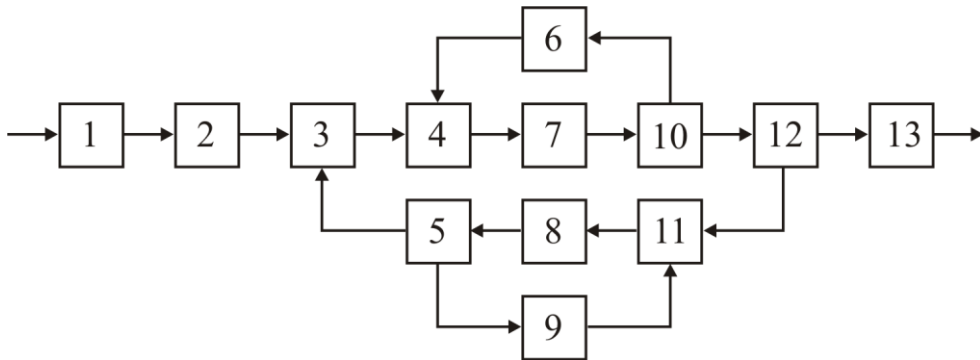
10)



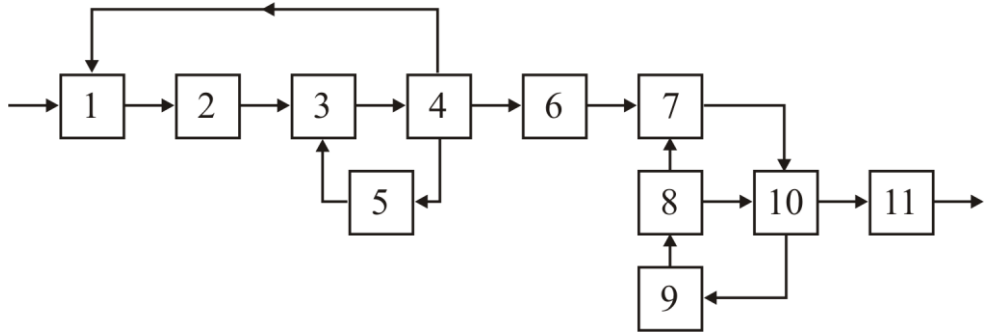
11)



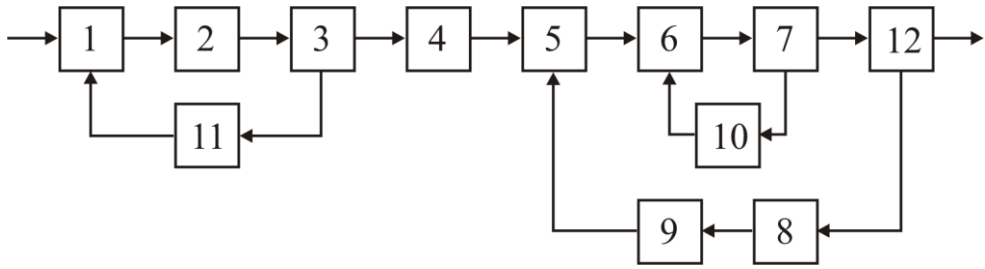
12)



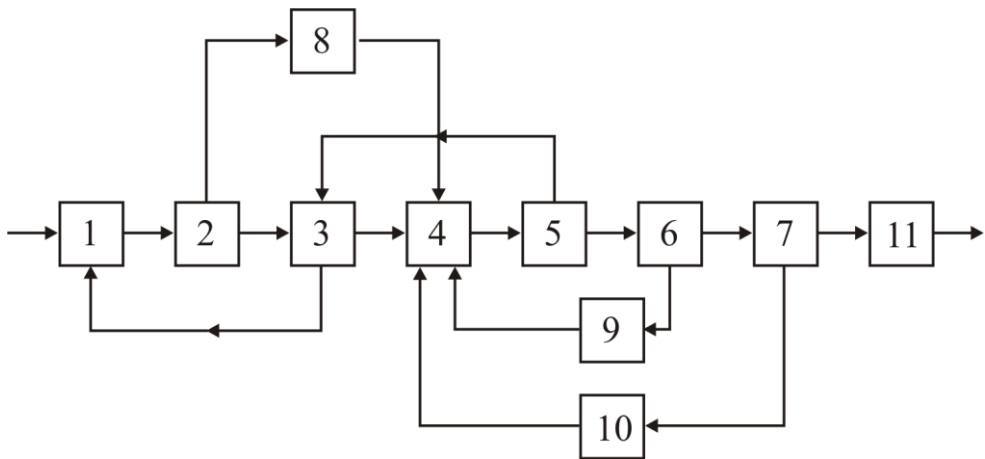
13)



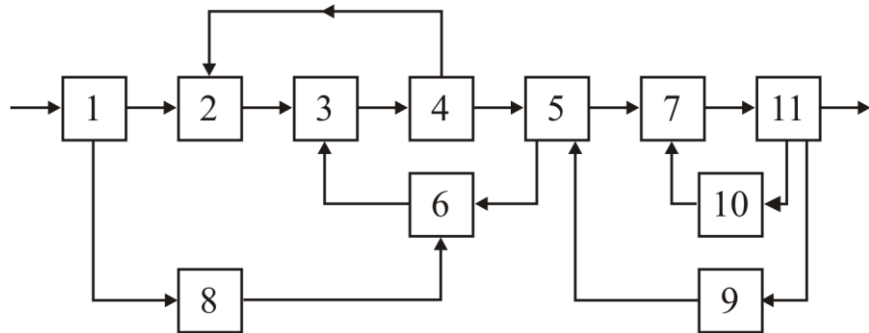
14)



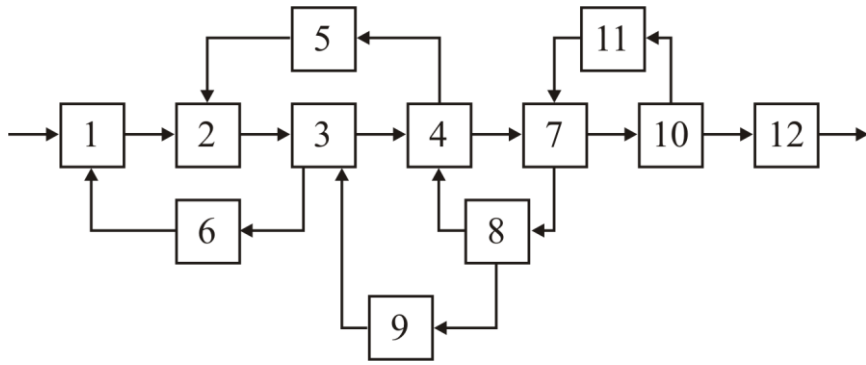
15)



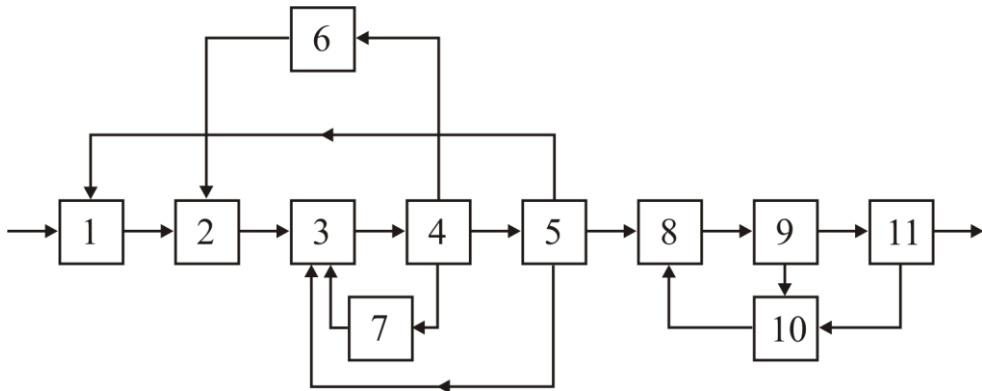
16)



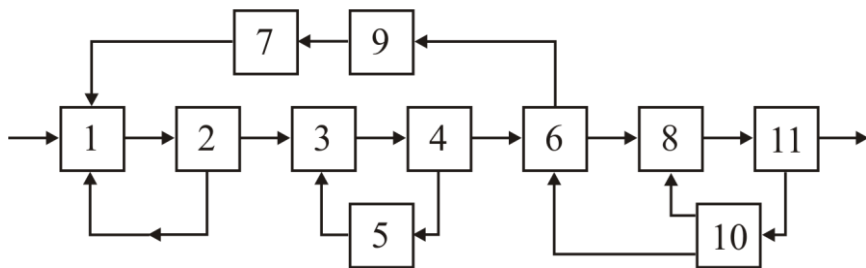
17)



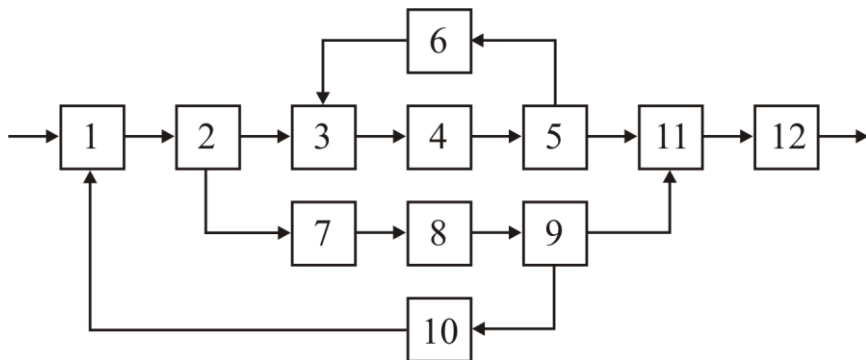
18)



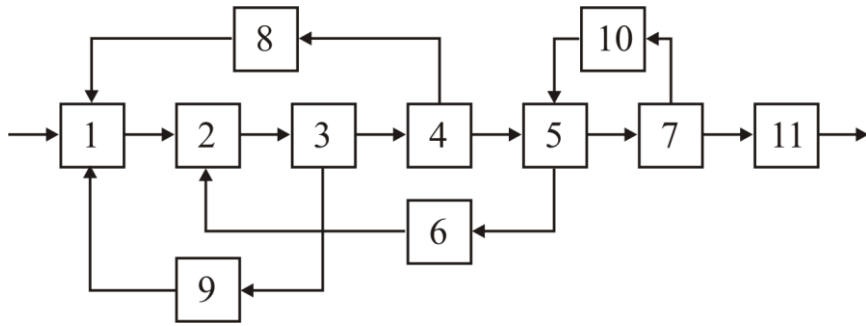
19)



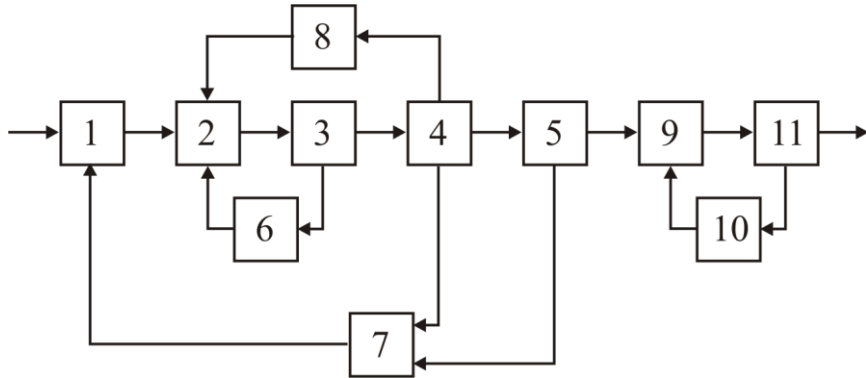
20)



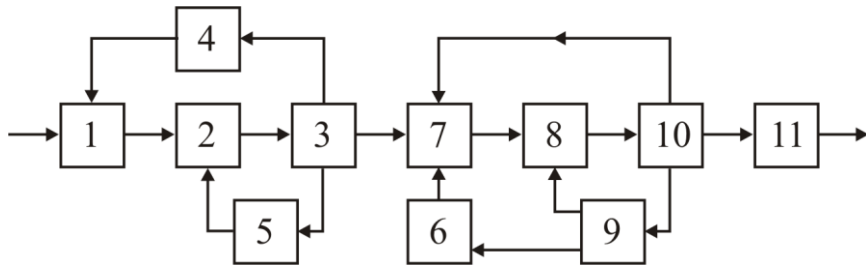
21)



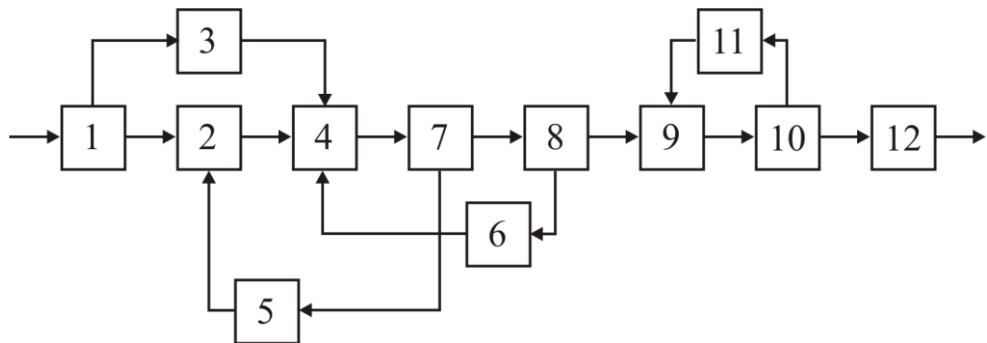
22)



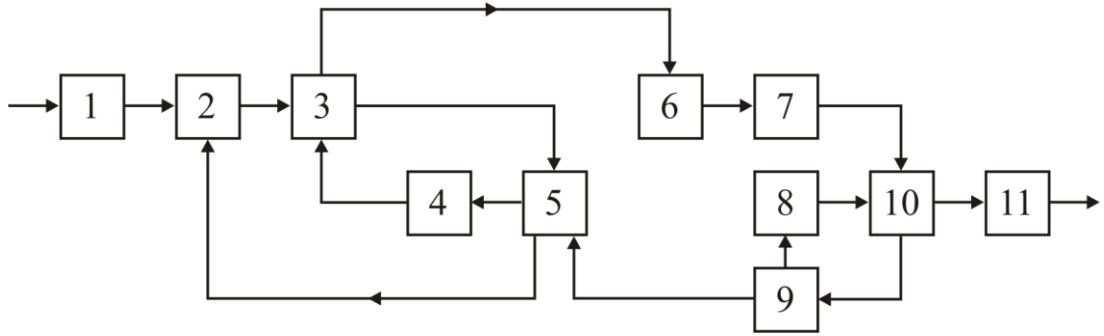
23)



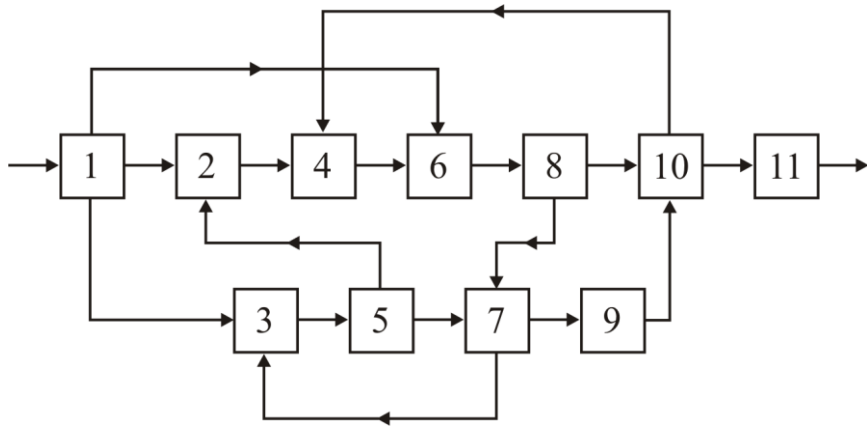
24)



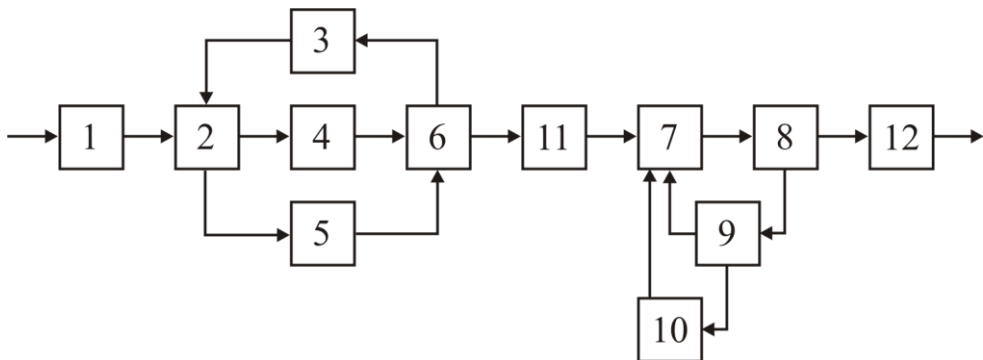
25)



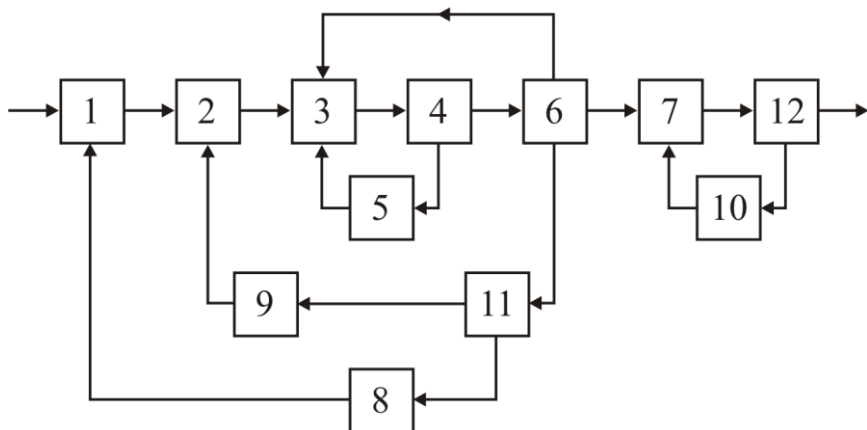
26)



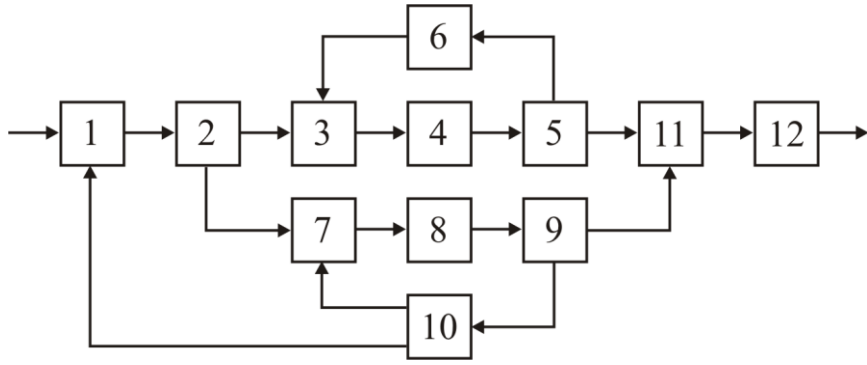
27)



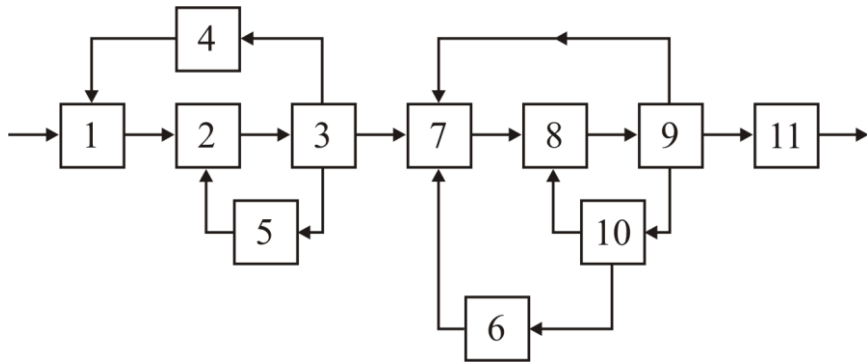
28)



29)



30)



3. МЕТОДИ РОЗРАХУНКУ МАТЕРІАЛЬНИХ І ТЕПЛОВИХ БАЛАНСІВ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СИСТЕМ

3.1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Основна задача розрахунку МТБ ХТС – знаходження параметрів стану потоків технологічної схеми: загальних і покомпонентних витрат; складів потоків, температур і ентальпій.

Сучасне високоефективне хімічне виробництво являє собою складну систему за числом апаратів і матеріально-теплових потоків з великим числом зворотних зв'язків. У силу цього складання і розрахунок матеріально-теплових балансів ХТС на рівні сучасних виробництв є складною задачею. Тому розглянемо лише в загальних рисах спочатку методику складання, а потім розрахунку матеріально-теплових балансів ХТС.

Розрахунок матеріально-теплових балансів ХТС в умовах стаціонарних режимів лежить в основі рішення задач проектування й експлуатації хімічних виробництв. Він складається з двох послідовних стадій:

- 1) постановка задачі і складання системи рівнянь балансів;
- 2) рішення системи рівнянь балансів ХТС.

На стадії проектування рішення матеріально-теплових балансів дозволяє визначити кількісні характеристики функціонування системи – матеріальні і теплові навантаження, продуктивність елементів системи, масові витрати стічних вод і викидів шкідливих газів в атмосферу, масові витрати пари, що гріє, і охолодної води, кількості теплоти й електроенергії. Матеріально-теплові навантаження і продуктивність елементів є вихідною інформацією для технологічного і конструкційного розрахунку елементів системи. На основі цих даних визначають технологічні показники ефективності функціонування системи — видаткові норми на сировину, пару, воду, коефіцієнти використання енергії.

Розрахунок матеріально-теплових балансів діючих хімічних виробництв також дозволяє визначити видаткові норми на сировину, матеріали й електроенергію. Крім того, розрахунок балансів дозволяє виявити невраховані втрати речовини і теплоти; уточнити систему регулювання; оцінити вплив помилок у вимірах контрольованих параметрів на значення параметрів фізичних потоків, що розраховуються.

3.2. СКЛАДАННЯ СИСТЕМ РІВНЯНЬ БАЛАНСІВ ХТС

В основі матеріальних і теплових балансів лежать закони збереження маси та енергії. При складанні матеріально-теплових балансів ХТС розглядають зовнішні і внутрішні джерела і стоки речовини або енергії системи. *Зовнішні джерела* речовини або енергії ХТС відповідають матеріальному й енергетичному фізичним потокам, що надходять у систему на переробку або

хімічне перетворення і забезпечують функціонування системи. Зовнішні стоки речовини або енергії ХТС відповідають матеріальному та енергетичному фізичним потокам, що утворюються в результаті функціонування системи.

Внутрішні джерела і стоки відображають ефекти хімічних і фізичних перетворень, що відбуваються всередині елементів системи. Внутрішнє джерело чи стік речовини відповідає кількості компонента, що вступив у хімічну реакцію, чи кількості компонента, що утворився в результаті хімічного перетворення. Внутрішнє джерело чи стік енергії відповідає кількості теплоти, що виділяється чи поглинається в результаті протікання всередині елементів ХТС хімічних і фізичних перетворень. Прийнято вважати, що кожному внутрішньому джерелу (стоку) речовини відповідає фіктивний матеріальний потік, а кожному внутрішньому джерелу (стоку) енергії — фіктивний тепловий потік.

Система рівнянь балансів ХТС являє собою сукупність незалежних рівнянь, що входять до системи рівнянь матеріальних і теплових балансів підсистем і до системи рівнянь функціональних зв'язків. Матеріально-теплові баланси підсистем ХТС можна записати як сукупність наступних незалежних рівнянь:

– матеріального балансу по загальній масовій витраті фізичних потоків речовини

$$\sum_{i=1}^n G_i = 0, \quad (3.1)$$

– матеріального балансу по масових витратах компонентів фізичних і фіктивних матеріальних потоків

$$\sum_{i=1}^n G_i c_{ij} + \sum_{k=1}^m G_k^* = 0; \quad j = 1 (1) p, \quad (3.2)$$

– теплового балансу по витраті теплоти фізичних і фіктивних теплових потоків

$$\sum_{i=1}^n G_i c_{p_i} t_i + \sum_{k=1}^m Q_k^* = 0$$

чи

$$\sum_{i=1}^n G_i h_i + \sum_{k=1}^m Q_k^* = 0, \quad (3.3)$$

де G_i – масова витрата речовини i -го потоку;

c_{ij} – частка j -го компонента в одиниці загальної витрати речовини (p – число компонентів);

G_k^* – масова витрата k -го фіктивного потоку;

c_{p_i} – середня питома теплоємність;

h_i – ентальпія;

t_i – температура;

Q_k^* – витрата теплоти k -го теплового фіктивного потоку.

Для визначення матеріальних і теплових навантажень на елементи і ХТС систему рівнянь балансів (3.1) – (3.3) доповнюють рівняннями функціональних зв'язків, що відображають хімічну сутність технологічних процесів функціонування ХТС; визначають покомпонентний склад фізичних потоків, величини джерел (стоків) хімічних компонентів, величини джерел (стоків) теплоти, враховують взаємозв'язок між потоками при відомих коефіцієнтах функціональних зв'язків або ККД елементів, залежність величин потоків від заданих параметрів технологічних режимів, продуктивності ХТС з випуску товарного продукту і т.д.

У загальному випадку рівняння функціональних зв'язків являють собою неявні функції багатьох перемінних виду

$$F_j(\pi_i, \eta, \alpha, v, k, D) = 0, \quad (3.4)$$

де π_i – параметри стану фізичних потоків;

η – ККД елементів ХТС;

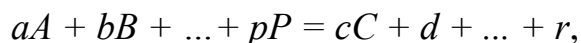
α – молярні співвідношення компонентів, що беруть участь у реакції;

v – стехіометричні коефіцієнти і фізико-хімічні константи;

k – конструкційні і технологічні параметри елементів ХТС;

D – параметри технологічних режимів ХТС.

Пояснимо складання рівнянь функціональних зв'язків на прикладі. Припустимо, що ХТС містить елементи, у яких проходить хімічне перетворення за стехіометричним рівнянням:



де a, b, p, c, d, r – відомі стехіометричні коефіцієнти; A, B, P, C, D, R – компоненти, що беруть участь у реакції.

За технологічним режимом даної ХТС задані молярні співвідношення компонентів ($\alpha_A, \alpha_B, \dots, \alpha_P$), ККД (η) і продуктивність елемента за продуктами реакції C . У цьому випадку рівняння функціональних зв'язків будуть мати наступний вид:

– рівняння покомпонентного з'єднання фізичних потоків

$$\sum_{i=1}^n c_{ij} - 1 = 0 \quad \text{чи} \quad \sum_{i=1}^n G_i c_{ij} - G_j = 0; \quad (3.5)$$

– рівняння витрати компонентів (G_{jn}), що беруть участь у реакції,

$$G_{jn} - \beta_i (G_j c_{ji}) = 0 \quad \text{чи} \quad G_{jn} - \beta_i G_{jC} = 0; \quad (3.6)$$

– рівняння витрати компонентів (G_{jn}^*), що відповідають фіктивним потокам,

$$G_{jn}^* - \beta_i^* G_{jC} = 0. \quad (3.7)$$

Кожне з рівнянь функціональних зв'язків (3.5)–(3.7) є окремим випадком загальної форми рівняння функціонального зв'язку ХТС:

$$F_i(G_j, G_{j1}, G_{j2}, \dots, G_{ji}, \beta, \beta^*, \eta, m_j) = 0, \quad (3.8)$$

де G_j – загальна масова витрата;

c_j – частка компонента С в j -му потоці;

$\beta_i = \beta(\alpha_i, M_i, M_C, \eta_j)$; $\beta_i^* = \beta^*(v_i, M_i, M_C, \eta_j)$ – постійні коефіцієнти;

M_i – молярна маса речовини;

v_i – коефіцієнт стехіометричного співвідношення компонентів;

α_i – молярні співвідношення компонентів.

Сукупність систем рівнянь балансів підсистем (3.1)–(3.3) і систем рівнянь функціональних зв'язків типу (3.5)–(3.7) являє собою систему рівнянь балансів ХТС.

3.3. КЛАСИФІКАЦІЯ МЕТОДІВ РІШЕННЯ МАТЕРІАЛЬНО-ТЕПЛОВИХ БАЛАНСІВ ХТС

Система рівнянь матеріальних і теплових балансів для сучасних ХТС містить велике число рівнянь, що досягає 100. При цьому число рівнянь системи рівнянь балансів ХТС завжди менше числа змінних, тому математично ці системи мають нескінченно багато ненульових рішень. Однак з технологічної точки зору число ненульових рішень завжди кінцева величина, оскільки будь-яка ХТС функціонує відповідно до деяких строго визначених технологічних умов. Кожне ненульове рішення повинне задовольняти вимогам технічного завдання і технологічних умов.

У загальному випадку розрахунок матеріально-теплових балансів стаціонарних режимів ХТС складається з рішення системи нелінійних рівнянь типу (3.1)–(3.3).

Методи рішення цієї задачі можна розділити на дві групи: *інтегральні і декомпозиційні*.

Суть *інтегральних* методів розрахунку ХТС полягає в об'єднанні систем рівнянь, що описують роботу окремих апаратів, в одну велику систему рівнянь і рішення цієї системи. До недоліків цієї групи методів варто віднести:

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

Перший недолік обумовлений тим, що до реальної ХТС входить багато апаратів, кожний з яких описується порівняно невеликою системою рівнянь. Однак сумарна розмірність єдиної системи рівнянь виходить настільки великою, що систему, що вийшла, не завжди вдається вирішити на сучасних ЕОМ.

Другий недолік – неповторюваність систем рівнянь – викликає необхідність при рішенні задачі на ЕОМ або складання щоразу заново програми обчислень, або здійснення вручну великої підготовчої роботи. При цьому досить складно автоматизувати рішення задачі розрахунку ХТС.

Суть *декомпозиційних* методів розрахунку полягає в тому, що кожен апарат чи групу апаратів розраховують окремо, а розрахунок усієї ХТС складається з послідовності розрахунків окремих апаратів. При цьому розмірність кожної окремої системи рівнянь невелика, тому що розраховується щоразу тільки один апарат. Крім того, типів апаратів порівняно небагато. Отже, можна заздалегідь скласти підпрограми для розрахунку окремих апаратів і з цих підпрограм (модулів) скласти програму розрахунку всієї ХТС, тобто автоматизувати процес розрахунку. У цьому сенсі декомпозиційні методи мають значні переваги перед інтегральними. Інтегральні і декомпозиційні методи підрозділяють на *ітераційні* і *безітераційні*.

3.4. ІТЕРАЦІЙНИЙ МЕТОД РОЗРАХУНКУ ХТС

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

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

Розглянемо спочатку перший спосіб завдання вихідних даних для розрахунку параметрів становищ потоків ХТС.

На початку розрахунку ХТС визначається ступінь свободи ХТС L_f , що дорівнює різниці між числом інформаційних змінних N (необхідних для складання повної математичної моделі ХТС) і числом інформаційних зв'язків (або умов) – M , що існують між інформаційними змінними:

$$L_f = N - M .$$

Інакше кажучи, ступінь свободи являє собою число вільних (незалежних) змінних, які необхідні і достатні для однозначного представлення процесу функціонування ХТС. Число ступенів свободи відповідає числу керованих параметрів і визначає число регуляторів, необхідних для забезпечення заданої якості функціонування ХТС.

Якщо при складанні математичної моделі ХТС виявляється, що число інформаційних зв'язків M більш числа інформаційних змінних N , тобто $M > N$, то задача дослідження поставлена некоректно або неправильно, тому що в цьому випадку неможливо знайти значення всіх інформаційних змінних, які задовольняють інформаційним зв'язкам ХТС.

У правильно поставленій задачі дослідження ХТС при $N = M$ не існує ніякої свободи дії в знаходженні чисельних значень інформаційних змінних: тільки цілком визначені чисельні значення інформаційних змінних задовольняють інформаційним зв'язкам системи.

Для випадку, коли задані усі вхідні і керуючі змінні, загальне число інформаційних зв'язків ХТС дорівнює $M=M_1+M_2$, де M_1 – число рівнянь, що описують залежність між вихідними і вхідними змінними всіх елементів ХТС, M_2 – число рівнянь, що задають значення вхідних і керуючих змінних – вихідні дані.

Загальна кількість змінних ХТС: $N = N_1 + N_2 + N_3$, де N_1 – число вихідних і проміжних змінних ХТС; N_2 – число вхідних змінних ХТС; N_3 – число управлінь. Очевидно, що $M_1 = N_1$, $M_2 = N_2 + N_3$, тобто число ступенів свободи ($L_f = N - M$) при першому способі завдання вихідних даних завжди дорівнює нулю.

При розрахунках ХТС можливі два випадки – система може бути розімкнута або замкнута. Розглянемо спочатку розрахунок розімкнутої ХТС.

Розрахунок параметрів стану розімкнутої схеми зводиться до послідовного однократного розрахунку елементів ХТС відповідно до рівнянь (1.1) і (1.2). Наприклад, для схеми, зображеної на **рис. 3.1**, заданими є значення параметрів векторів вхідних потоків $X_1^{(1)}$, $X_1^{(2)}$ і значення параметрів векторів управлінь $U_1, U_2 \dots$. За рівнянням (1.1) можна визначити $Y_1^{(1)}, Y_1^{(2)}, Y_1^{(3)}$. Для цього можуть бути використані спеціальні обчислювальні блоки (програмні модулі, наприклад, підпрограми або процедури), призначені для визначення вектора Y за відомими векторами X і U . Відповідно до (1.2), $X_1^{(4)} = Y_2^{(1)}$. Тоді можна обчислити $Y_1^{(4)}$, а потім аналогічним чином знайти параметри стану потоків елементів 5, 2, 3 і 6.

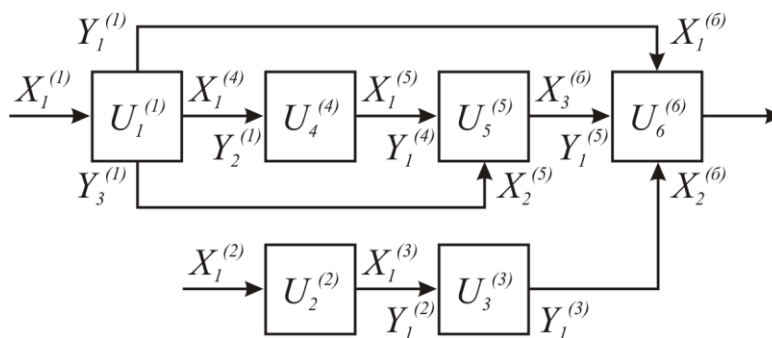


Рис. 3.1. Розімкнута схема: $X_1^{(k)}$ – вектор параметрів стану i -го вхідного потоку k -го блоку ХТС; $Y_j^{(l)}$ – вектор параметрів стану j -го вихідного потоку l -го блоку ХТС

Розрахунок замкнутих схем ґрунтується на розриві зворотних зв'язків. У схемі на **рис. 3.2** можна розірвати, наприклад, потоки 1, 2, 3 і таким чином одержати розімкнуту схему. При розриві p -го потоку, що зв'язує k -ий блок з l -им, вектор змінних після розриву будемо позначати через X_p^* , а вектор змінних до розриву Y_p^* .

Для відповідності режиму в розімкнутій схемі режиму в замкнутій схемі необхідно, щоб для кожного «розірваного» потоку виконувалася рівність:

$$X_p^* = Y_p^*; p = 1, 2, \dots, m, \quad (3.9)$$

де m – число «розірваних» потоків.

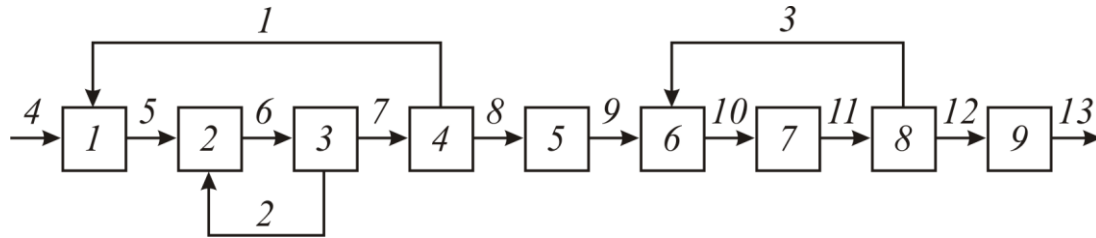


Рис. 3.2. Замкнута схема

Вектори Y_p^* ($p = 1, 2, 3$) на **рис. 3.2** є деякими функціями X_p^* :

$$Y_p^* = \varphi_p(X_1^*, \dots, X_p^*). \quad (3.10)$$

Підставивши (3.10) у (3.9), одержимо систему нелінійних рівнянь

$$X_p^* = \varphi_p(X_1^*, \dots, X_p^*). \quad (3.11)$$

Зручніше цю систему представити у вигляді:

$$F_p(X_1^*, \dots, X_p^*) = 0; p = 1, 2, 3. \quad (3.12)$$

Якщо параметричність усіх потоків однакова і дорівнює m , то для розрахунку схеми, представленої на **рис. 3.3а**, необхідно вирішити систему нелінійних рівнянь, порядок якої дорівнює $3m$. При цьому на кожній ітерації для визначення лівих частин рівняння (3.12) необхідно розраховувати розімкнуту схему **рис. 3.3а** в наступній послідовності: {1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9}.

Систему рівнянь (3.12) можна спростити. Покажемо це на прикладі схеми, приведеної на **рис. 3.3б**. Спочатку розраховується сукупність блоків 3, 4, 1, 2; незалежність їхнього розрахунку видна з **рис. 3.3**.

Іншими словами вирішується система рівнянь:

$$X_6^* = \varphi(X_6^*). \quad (3.13)$$

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

$$X_3^* = \varphi(X_3^*). \quad (3.14)$$

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

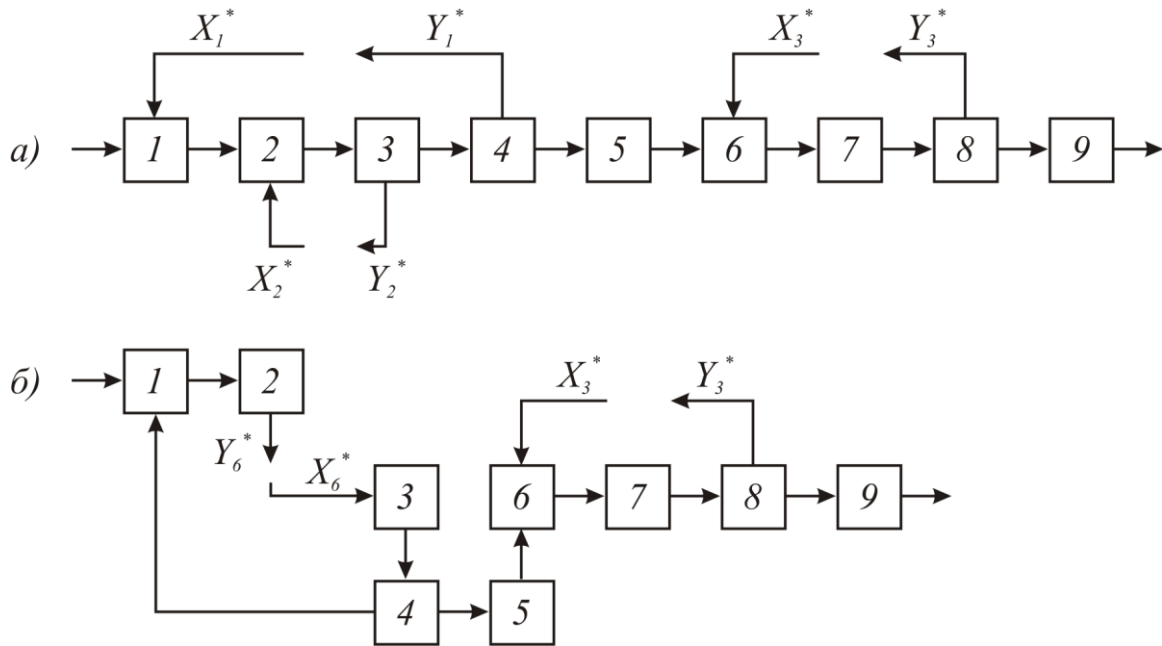


Рис. 3.3. Варіанти розімкнутої схеми, що відповідає замкнутій схемі, приведеній на рис. 3.2.

Таким чином, безпосередньо перед розрахунком ХТС необхідно виконати аналіз її структури, що полягає у виділенні комплексів, тобто сукупностей елементів ХТС, що розраховуються спільно, визначенні оптимальної множини потоків, що розриваються, і визначенні послідовності розрахунку отриманої розімкнутої схеми. Методи аналізу структури розглянуті в розділі 2.

При другому варіанті завдання вихідних даних, коли задані рівняння і деяка проміжна, вхідна і вихідна перемінні, задача розрахунку ХТС ускладнюється.

Рішення цієї задачі розглянемо на наступному прикладі.

Вихідна тверда речовина надходить в апарат-розчинник **1** (рис. 3.4), де відбувається її розчинення у воді. Концентрація речовини А на виході з розчинника задана (регламентована перемінна). Розчин надходить у реактор **2**, де відбувається його взаємодія з речовиною В. У результаті реакції виходить речовина, що випадає в осад. Речовину А подають у реактор у надлишку, тому на виході з нього речовина В відсутня. Суспензія надходить у перший фільтр **3**, після чого фільтрат направляють на подальшу переробку, а осад – на відмивання від речовини А в промивач **4** і потім на другий фільтр **5**. Фільтрат після підживлення свіжою водою в змішувачі **6** повертається в апарат-розчинник.

З проектного завдання відомі управління елементів ХТС, параметри стану потоків 1 і 8, а також вміст компонента А в осаді на виході з другого фільтра. Потрібно розрахувати значення витрат і концентрацій компонентів у всіх потоках технологічної схеми.

Перед розрахунком схеми необхідно перевірити умову рівності нулю числа ступенів свободи системи L_f .

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

У нашому прикладі є дві задані змінні: проміжна і вихідна (концентрація компонента А на виході з розчинника і його вміст в осаді). У той же час дві вхідні змінні (витрати води, що надходить у промивач, і витрата води, що підживлює) є розрахунковими, тому умову рівності нулю числа ступенів свободи системи виконано.

Замінімо в розглянутій схемі технологічні зв'язки інформаційними потоками (рис. 3.4, б).

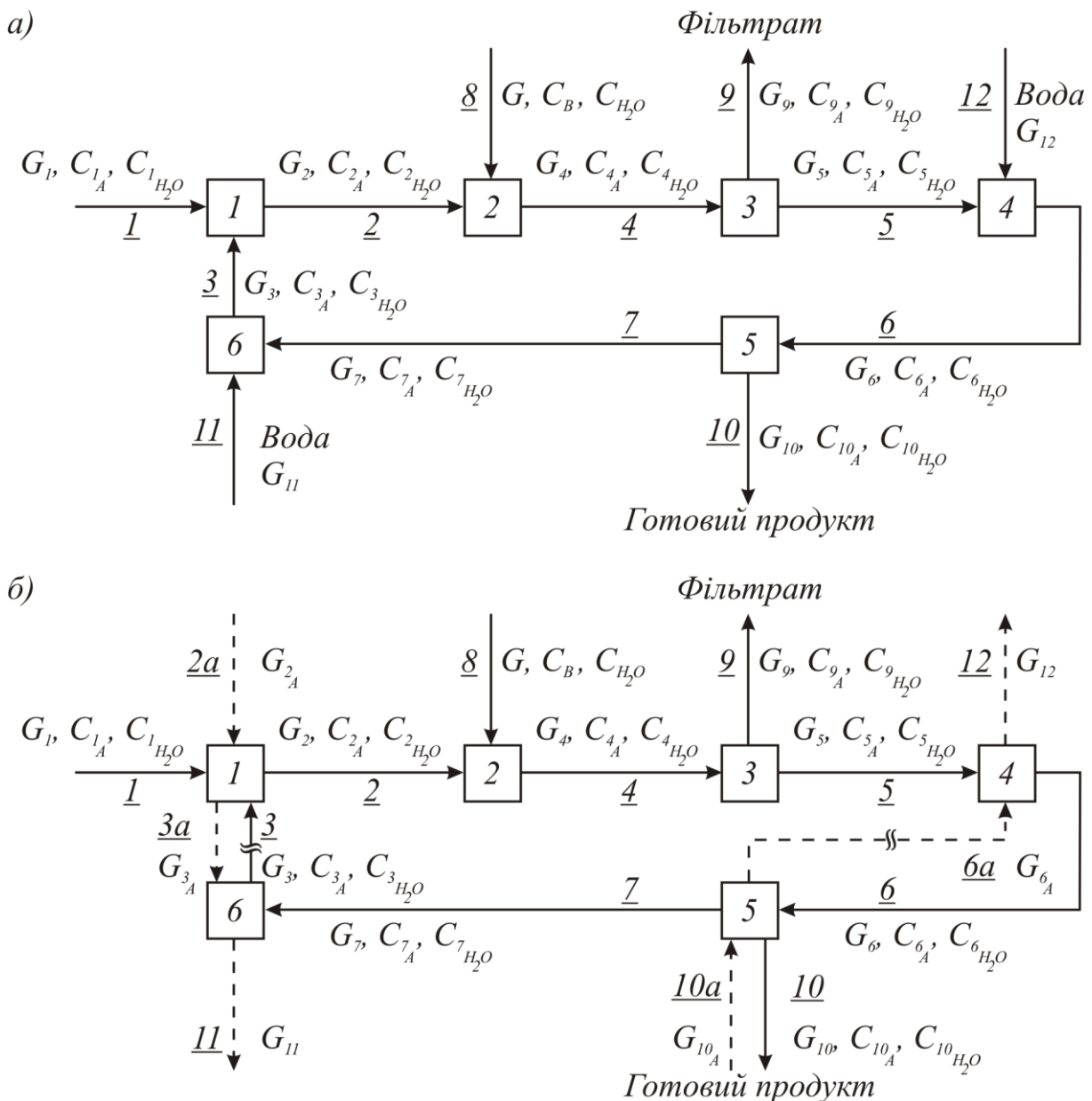


Рис. 3.4. ХТС із технологічними (а) і інформаційними (б) потоками

Властивості кожного фізичного потоку ХТС характеризують набором

параметрів (інформаційних змінних). Якщо кожен інформаційну змінну представити деяким інформаційним потоком, то при математичному моделюванні системи одному фізичному потоку ХТС буде відповідати сукупність інформаційних потоків. Напрямок кожного з цих потоків при моделюванні системи в загальному випадку може не збігатися з напрямком фізичного потоку.

У кожному вхідному інформаційному потоці всі змінні задані. Вхідними інформаційними змінними можуть бути як вхідні, так і вихідні змінні елемента ХТС. Для кожного елемента ХТС складемо обчислювальний блок (модуль), що за відомими вхідними інформаційними змінними обчислює вихідні інформаційні змінні. Задані проміжна і вихідна змінні ХТС стануть вхідними інформаційними змінними, а невідомі вхідні – вихідними (розрахунковими) інформаційними змінними.

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

$$G_3 = G_1(C_{1A} - C_{2A}) / (C_{2A} - C_{3A}). \quad (3.15)$$

$$G_2 = G_1 + G_3. \quad (3.16)$$

$$C_{2H_2O} = (G_1 C_{1H_2O} + G_3 C_{3H_2O}) / G_2. \quad (3.17)$$

Якщо розірвати *3* і *6a* потоки, можна послідовно розрахувати *1—6* блоки інформаційної схеми. Потім вирішується система нелінійних рівнянь щодо змінних у місцях розриву зворотних зв'язків таким способом, як це було описано вище.

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

3.5. ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ, ЩО ВИКОРИСТОВУЮТЬСЯ ПРИ РОЗРАХУНКУ МТБ ХТС ІТЕРАЦІЙНИМ МЕТОДОМ

Розрізняють два методи розрахунку системи нелінійних рівнянь стаціонарних режимів ХТС: локальний і глобальний. У задачу локального методу входить рішення системи нелінійних рівнянь з наближення, що знаходиться навколо цього рішення. Задачею глобального методу є визначення

всіх рішень системи нелінійних рівнянь. Частіше застосовуються локальні методи рішення систем нелінійних рівнянь: методи простої ітерації і її різновиди, що поліпшують збіжність; метод Ньютона та його модифікації, інші модифікації методу січних, зокрема метод Вольфа.

Метод простої ітерації складається в перетворенні розв'язуваних рівнянь на вид, що виражає нове значення шуканої змінної через її початкове наближення, і послідовному розрахунку за цією рекурентною формулою до досягнення збіжності рішення, тобто збігу значень у двох послідовних наближеннях із заданою точністю. Цей метод найбільш простий, але він часто повільно сходиться або взагалі розходиться.

Метод Ньютона сходиться швидко, якщо задане добре початкове наближення. Однак він вимагає на кожному ітераційному кроці обчислення матриці похідних від лівої частини системи рівнянь балансів. У системі нелінійних рівнянь балансів ХТС зі складною лівою частиною для одержання аналітичних виражень для часток похідних необхідна велика кількість попередніх обчислювальних операцій. Крім того, при поганому початковому наближенні метод Ньютона або погано сходиться, або взагалі розходиться.

Метод Вольфа при досить гарному початковому наближенні сходиться приблизно з такою ж швидкістю, як і метод Ньютона. Від метода Ньютона він вигідно відрізняється тим, що не вимагає обчислення матриці особистих похідних. Однак у методі Вольфа для початку роботи необхідно мати $N+1$ початкових наближень, що саме по собі є досить важкою задачею.

Усі перераховані методи відносяться до ітераційних методів.

В усіх цих методах $(k+1)$ -е наближення шукається за значеннями уже відомих $k, k-1, \dots, k-s$ наближень, де s – величина, різна для різних методів. Вона характеризує число використовуваних наближень. Так, для методу ітерації і методу Ньютона $s = 0$, а для методу Вольфа $s = n$. Розглянемо більш докладно деякі з цих методів.

Метод простої ітерації і способи, що поліпшують його збіжність. При використанні методу простої (чи модифікованої) ітерації початкова система повинна бути перетворена на вид:

$$\begin{aligned} X_i &= \varphi_i (X_1, \dots, X_n) \\ i &= 1, \dots, n. \end{aligned} \quad (3.18)$$

У цьому випадку $(k+1)$ -е наближення знаходиться за ітераційною схемою:

$$\begin{aligned} X_i^{k+1} &= \varphi (X_1^k, \dots, X_n^k) \\ i &= 1, \dots, n \\ k &= 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (3.19)$$

Тут, як і надалі, верхній індекс означає номер ітерації, а через X_i^0 позначене початкове наближення, з якого починається ітераційний процес.

Для збіжності ітераційного процесу досить виконання нерівності:

$$\sum_{j=1}^n \left| \frac{\partial \phi_i}{\partial x_j} \right| < 1$$

$$i = 1, \dots, n. \quad (3.20)$$

Метод простої ітерації рекомендується застосовувати тоді, коли добре відоме початкове наближення та початкова система легко перетвориться на вид (3.18). На жаль, ітераційна процедура (3.19) часто розходиться. При використанні модифікованої ітерації ($k+1$)-е наближення обчислюють за формулою:

$$X_i^{k+1} = \alpha X_i^k + (1-\alpha) \phi(X_1^k, \dots, X_n^k); \quad i = 1, \dots, n; \quad k=0, 1, 2, \dots; \quad 0 < \alpha < 1. \quad (3.21)$$

Відзначимо, що метод простої ітерації є частковим випадком методу модифікованої ітерації, при цьому $\alpha = 0$. Обчислювальна схема методу модифікованої ітерації має вид:

1. За допомогою відомих значень попередньої ітерації обчислюють нове наближення за формулами:

$$y_i = y_i(x_1, \dots, x_n)$$

$$i = 1, \dots, n.$$

2. Обчислюють:

$$S = \sum_{i=1}^n [(x_i - y_i) / x_i]^2.$$

3. Розраховують:

$$x_i = \alpha x_i + (1-\alpha) y_i$$

$$i = 1, \dots, n.$$

4. Перевіряють виконання:

$$S > \epsilon, \quad (3.22)$$

де ϵ – задана похибка обчислень.

Якщо нерівність (3.22) виконано, то розрахунок повторюється з пункту 1. У противному випадку процес обчислень закінчується.

Метод Ньютона. Сутність методу Ньютона (його також називають методом лінеаризованих ітерацій) полягає в тому, що рішення системи нелінійних рівнянь зводиться до рішення послідовності систем лінійних алгебраїчних рівнянь виду:

$$F_i(x^k) + \sum_{j=1}^n f'_{i,x_j}(x^k) \cdot \Delta x_j^k = 0. \quad (3.23)$$

Для одержання системи (3.23) функції $f_i(x_1, \dots, x_n)$ розкладають у ряд Тейлора, і лінійні частини дорівнюють нулю.

Практичне застосування методу Ньютона пов'язано з деякими обчислювальними труднощами. По-перше, на кожному кроці ітерації потрібно вирішувати лінійну систему рівнянь. По-друге, на кожному кроці потрібно визначати не тільки значення функцій f_i ($i = 1, \dots, n$), але також n^2 елементів матриці $F'x^k$ і якщо частинні похідні $f_{i,x}$ не мають простого аналітичного виду, то часто бажано обійтися без їхнього обчислення.

Найбільш простий спосіб уникнути обчислень похідних складається в апроксимації частинних похідних різницевиими відносинами, тобто у використанні наближених формул:

$$\frac{\partial f_i}{\partial x_j} \approx \frac{f_i(x_1, \dots, x_j + \delta_j, \dots, x_n) - f_i(x_1, \dots, x_j, \dots, x_n)}{\delta_j}$$

$$i = 1, 2, \dots, n; \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Одна з вимог, яким повинен задовольняти ітераційний процес, полягає в тому, щоб кожна наступна ітерація була краще попередньої, тобто повинна виконуватися нерівність:

$$|F(x^{k+1})| < |F(x^k)|. \quad (3.24)$$

Сам метод Ньютона не завжди задовольняє цій умові, тому при поганому початковому наближенні часто використовується наступна модифікація цього методу:

$$x^{k+1} = x^k + \beta^k \Delta x^k. \quad (3.25)$$

Тут β^k вибирають або постійними, або підбирають на кожній ітерації так, щоб виконувалося співвідношення (3.24).

Обчислювальна схема методу Ньютона має наступний вид:

1. Обчислення $y_i = f_i(x_1, \dots, x_n)$; $i = 1, \dots, n$...
2. Обчислення матриці похідних; для цього, починаючи від $j = 1$ до $j = n$ із кроком 1, обчислюють величини

$$\delta_i = \begin{cases} 0,01, & \text{якщо } x_j = 0 \\ 0,01x_j, & \text{якщо } x_j \neq 0 \end{cases}$$

$$x_j = x_j + \delta_i; \quad z_i = f_i(x_1, \dots, x_n); \quad a_{i,j} = (z_i - y_i) / \delta_i; \quad i = 1, \dots, n;$$

$$x_j = x_j - \delta_i.$$

3. Рішення системи лінійних алгебраїчних рівнянь методом Гауса для визначення Δx_i ($i = 1, \dots, n$).
4. Обчислення нового наближення $x_j = x_j + \Delta x_i$; $i = 1, \dots, n$.

5. Перевірка умов закінчення рахунку. Потім обчислювальний процес або повторюється з пункту 1, якщо ці умови не виконуються, або припиняється.

3.6. МАТРИЧНИЙ (БЕЗІТЕРАЦІЙНИЙ) МЕТОД РОЗРАХУНКУ ХТС

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

$$[Y]=[A] \times [X], \quad (3.26)$$

де $[A]$ – матриця перетворення, чи операційна матриця, елементи якої відповідають коефіцієнтам функціонального зв'язку між елементами векторів вхідних (x_1, \dots, x_m) і вихідних (y_1, \dots, y_n) перемінних даного апарата. Елементами матриці перетворення A можуть бути коефіцієнти поділу, ступінь перетворення, вихід цільового продукту, ККД, ступінь абсорбції й ін., а також коефіцієнти рівняння лінійної регресії.

Методи побудови матриць перетворення елементів ХТС підрозділяються на дві групи: аналітичні і статистичні.

Аналітичний метод визначення елементів операційних матриць (матриць перетворення) заснований на одержанні аналітичних рішень рівнянь математичної моделі апарата системи. Для елемента ХТС, процеси в якому описуються математичними моделями з зосередженими параметрами (реактор ідеального змішання, теплообмінники змішання і т.п.), обчислення коефіцієнтів передачі, що зв'язують вихідні і вхідні параметри, не представляє особливих труднощів. Значно більш складною задачею є аналітичне визначення коефіцієнтів передачі для процесів з розподіленими параметрами, що описуються рівняннями в частинних похідних. Тому аналітичний метод застосуємо для обмеженого класу задач.

Статистичний метод (чи метод статистичних випробувань) може бути використаний для одержання операційних матриць елементів ХТС практично з будь-яким ступенем складності їхніх вихідних математичних моделей.

Сутність статистичного методу полягає в знаходженні коефіцієнтів матриць перетворення апаратів системи шляхом застосування методів планування експерименту на математичній моделі, що відбиває фізико-хімічну природу процесу. Велика кількість параметрів елементів ХТС робить практично неможливим визначення матриць перетворення простим перебором перемінних.

Найбільш поширені повний і дробовий факторний експерименти, що описані в главі 4.

Математична модель ХТС може бути отримана об'єднанням матриць перетворення окремих елементів відповідно до їх технологічної структури.

Розрахунок ХТС за допомогою операційних матриць зводиться до складання еквівалентної матриці перетворення системи, що виражає взаємозв'язок усіх змінних ХТС і може бути записана таким чином:

$$[C] [X^{(1)}, X^{(2)}, \dots, X^{(n)}, Y_o]^T = 0, \quad (3.27)$$

X^k – вектор-рядок вхідних змінних k -го апарата; Y_o – вектор-рядок вихідних змінних системи; $[C]$ – еквівалентна матриця перетворення (чи матриця рівнянь зв'язку ХТС), елементи якої відповідають елементам операційних матриць окремих апаратів; n – число апаратів ХТС; T – знак транспонування.

При розрахунку ХТС значення вхідних змінних системи і проектних технологічних і конструктивних параметрів виділяють у самостійний вектор U з відповідною йому матрицею перетворення B_1 . Тому що вихідні змінні системи не роблять впливу на інші параметри, вони можуть розраховуватися окремо після визначення значень проміжних змінних ХТС. Тоді математичний опис ХТС можна представити в наступному виді:

$$[C_1] [X_1^{(1)}, X_1^{(2)}, \dots, X_1^{(n)}]^T + [B_1]U = 0 \quad (3.28 \text{ а})$$

$$[Y] = [C_2] [X_1^{(1)}, X_1^{(2)}, \dots, X_1^{(n)}]^T + [B_2]U, \quad (3.28 \text{ б})$$

де $[C_1]$, $[C_2]$, $[B_1]$, $[B_2]$ – матриці відповідних рівнянь зв'язку; $X_1^{(k)}$ – вектор-стовпець вхідних перемінних k -го апарата, за винятком перемінних, що входять у вектор U ; U – вектор-стовпець вхідних змінних ХТС і проектних технологічних і конструктивних параметрів; Y – вектор-рядок вихідних змінних ХТС.

Система рівнянь (3.28) є лінійною, тому розрахунок ХТС за цими рівняннями не вимагає ітераційного уточнення параметрів стану потоків між апаратами. ХТС розраховують у два прийоми: спочатку, у результаті рішення системи лінійних рівнянь (3.28 а), знаходять вектор проміжних змінних, а потім за рівнянням (3.28 б) визначають вектор вихідних змінних технологічної схеми.

Побудову матриць $[C_1]$, $[C_2]$, $[B_1]$, $[B_2]$ пояснимо на прикладі спрощеної технологічної схеми одержання етанолу каталітичним окислюванням етилену в паровій фазі (рис. 3.5).

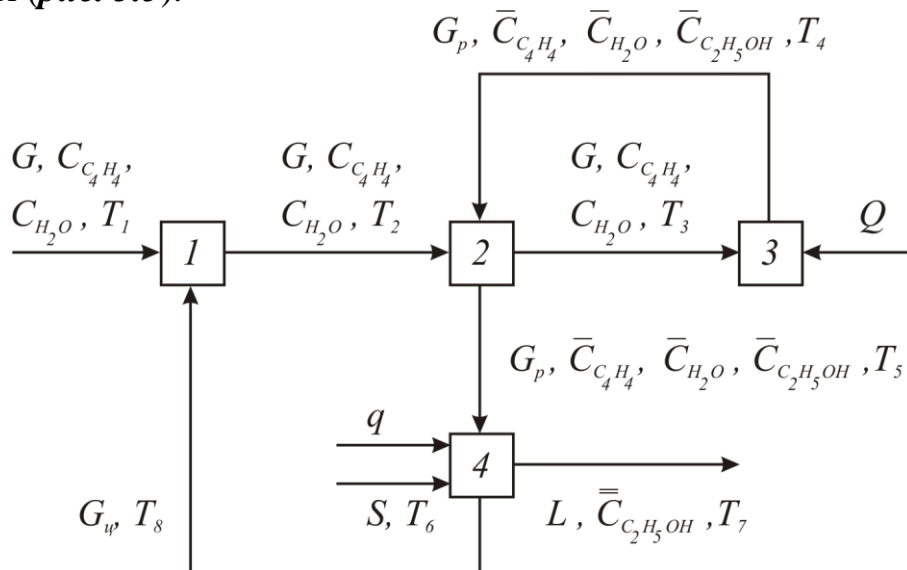


Рис. 3.5. Спрощена схема одержання етанолу:
1 – змішувач; 2 – теплообмінник; 3 – реактор; 4 – абсорбер

У змішувач *1* подають воду, етилен і циркуляційний газ. Отримана газова суміш нагрівається в теплообміннику *2* за рахунок теплоти реакційної суміші і надходить у трубчасту піч, сполучену з реактором *3*. У реакторі відбувається гідратація етилену. Реакційна суміш надходить в абсорбер *4*, звідки водяний розчин етанолу направляється на очищення, а циркуляційний газ – у змішувач *1*. Математичні моделі окремих елементів ХТС мають вид:

$$\text{змішувач} - \begin{bmatrix} G \\ C_{C_2H_4} \\ C_{H_2O} \\ T_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G_{C_2H_4} \\ G_{H_2O} \\ G_{\text{ц}} \\ T_1 \\ T_8 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.29)$$

$$\text{теплообмінник} - \begin{bmatrix} T_3 \\ T_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} & b_{15} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} & b_{25} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G \\ G_P \\ T_2 \\ T_4 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.30)$$

$$\text{реактор} - \begin{bmatrix} G_P \\ \bar{C}_{C_2H_4} \\ \bar{C}_{H_2O} \\ \bar{C}_{C_2H_5OH} \\ T_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \\ d_{41} & d_{42} & d_{43} & d_{44} & d_{45} & d_{46} \\ d_{51} & d_{52} & d_{53} & d_{54} & d_{55} & d_{56} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G \\ C_{C_2H_4} \\ C_{H_2O} \\ T_3 \\ Q \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.31)$$

$$\text{абсорбер} - \begin{bmatrix} G_{\dots} \\ T_8 \\ L \\ T_7 \\ C_{C_2H_5OH} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{11} & f_{12} & f_{13} & f_{14} & f_{15} & f_{16} & f_{17} & f_{18} & f_{19} \\ f_{21} & f_{22} & f_{23} & f_{24} & f_{25} & f_{26} & f_{27} & f_{28} & f_{29} \\ f_{31} & f_{32} & f_{33} & f_{34} & f_{35} & f_{36} & f_{37} & f_{38} & f_{39} \\ f_{41} & f_{42} & f_{43} & f_{44} & f_{45} & f_{46} & f_{47} & f_{48} & f_{49} \\ f_{51} & f_{52} & f_{53} & f_{54} & f_{55} & f_{56} & f_{57} & f_{58} & f_{59} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G_P \\ \bar{C}_{H_2O} \\ \bar{C}_{C_2H_4} \\ \bar{C}_{C_2H_5OH} \\ T_5 \\ q \\ S \\ T_6 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.32)$$

Матриця C_1

$$\begin{bmatrix}
 -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{13} & a_{15} \\
 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{23} & a_{25} \\
 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{33} & a_{34} \\
 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{43} & a_{44} \\
 b_{11} & 0 & 0 & b_{13} & -1 & 0 & b_{12} & 0 & 0 & 0 & b_{14} & 0 & 0 & 0 \\
 b_{21} & 0 & 0 & b_{23} & 0 & -1 & b_{22} & 0 & 0 & 0 & b_{24} & 0 & 0 & 0 \\
 d_{11} & d_{12} & d_{13} & 0 & d_{14} & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 d_{21} & d_{22} & d_{22} & 0 & d_{24} & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 d_{31} & d_{32} & d_{33} & 0 & d_{34} & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 d_{41} & d_{42} & d_{43} & 0 & d_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 d_{51} & d_{52} & d_{53} & 0 & d_{54} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & f_{16} & f_{11} & f_{13} & f_{12} & f_{14} & 0 & -1 & 0 & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & f_{26} & f_{21} & f_{23} & f_{22} & f_{24} & 0 & 0 & 0 & -1
 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix}
 G \\
 C_{C_2H_4} \\
 C_{H_2O} \\
 T_2 \\
 T_3 \\
 T_5 \\
 G \\
 \bar{C}_{C_2H_4} \\
 \bar{C}_{H_2O} \\
 C_{C_2H_5OH} \\
 T_4 \\
 G_{\Pi} \\
 T_8
 \end{bmatrix} +$$

Матриця B_1

$$\begin{bmatrix}
 a_{11} & a_{12} & a_{14} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{16} \\
 a_{21} & a_{22} & a_{24} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{26} \\
 a_{31} & a_{32} & a_{34} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{36} \\
 a_{41} & a_{42} & a_{44} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{46} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_{15} \\
 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_{25} \\
 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 & 0 & d_{16} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & d_{25} & 0 & 0 & 0 & d_{26} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & d_{35} & 0 & 0 & 0 & d_{36} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & d_{45} & 0 & 0 & 0 & d_{46} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & d_{55} & 0 & 0 & 0 & d_{56} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & f_{15} & f_{17} & f_{18} & f_{19} & 0 \\
 0 & 0 & 0 & 0 & f_{25} & f_{27} & f_{28} & f_{29} & 0
 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix}
 G_{C_2H_4} \\
 G_{H_2O} \\
 T_1 \\
 Q \\
 q \\
 S \\
 T_6 \\
 1
 \end{bmatrix} = 0 \tag{3.33}$$

У виразах (3.29)–(3.32) G , G_{Π} і G_p – витрати газоводяної суміші, циркуляційного газу і реакційної суміші; $G_{C_2H_4}$ і G_{H_2O} – витрати етилену і води на вході в систему; $C_{C_2H_4}$ і C_{H_2O} – концентрації етилену і води в газоводяній суміші; \bar{C}_{H_2O} , $\bar{C}_{C_2H_4}$, $\bar{C}_{C_2H_5OH}$ – концентрації водяної пари, етилену і етанолу на виході з реактора; $C_{C_2H_5OH}$ – концентрація спирту у водяному розчині; Q –

кількість теплоти, що йде на нагрівання газоводяної суміші в трубчастій печі; q – кількість теплоти, що поглинається охолодною водою; L – витрата спирту; S – густина зрошення в абсорбері; $T_1 - T_8$ – температури потоків.

На підставі матриць перетворення окремих елементів ХТС можуть бути отримані еквівалентні матриці перетворення $[C_1]$ і $[B_1]$. Система рівнянь (3.28) для даного прикладу прийме вигляд (3.33).

Наприклад, перші рядки матриць $[C_1]$ і $[B_1]$ заповнюються таким чином. З (3.29) випливає, що:

$$G = a_{11} G_{C_2H_4} + a_{12} G_{H_2O} + a_{13} G_{\text{ц}} + a_{14} T_1 + a_{15} T_8 + a_{16}. \quad (3.34)$$

Якщо в (3.34) включити усі вхідні ($G_{C_2H_4}$, G_{H_2O} , T_1 , Q , q , S , T_6) і проміжні змінні (G , $C_{C_2H_4}$, C_{H_2O} , T_2 , T_3 , T_5 , $G_{\text{ц}}$, $G_{\text{р}}$, \bar{C}_{H_2O} , $\bar{C}_{C_2H_4}$, $\bar{C}_{C_2H_5OH}$, T_4 , T_8) з коефіцієнтами, рівними нулю, у тому випадку, коли розглянута змінна не входить у (3.34), і зі своїм коефіцієнтом у протилежному випадку, то одержимо:

$$\begin{aligned} & -G + O \cdot C_{C_2H_4} + O \cdot C_{H_2O} + O \cdot T_2 + O \cdot T_3 + O \cdot T_5 + O \cdot G_{\text{р}} + O \cdot \bar{C}_{C_2H_4} + \\ & O \cdot \bar{C}_{H_2O} + O \cdot \bar{C}_{C_2H_5OH} + O \cdot T_4 + a_{13} G_{\dots} + a_{15} T_8 + a_{11} G_{C_2H_4} + \alpha_{12} G_{H_2O} + \\ & \alpha_{14} T_1 + O \cdot Q + O \cdot q + O \cdot S + O \cdot T_6 + \alpha_{15} = 0 \end{aligned} \quad (3.35)$$

чи

$$\begin{aligned} & \left[-1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ \alpha_{12} \ \alpha_{15} \right] \times \\ & \left[G \ C_{C_2H_4} \ C_{H_2O} \ T_2 \ T_3 \ T_5 \ G_{\text{р}} \ \bar{C}_{C_2H_4} \ \bar{C}_{H_2O} \ \bar{C}_{C_2H_5OH} \ T_4 \ G_{\dots} \ T_8 \right]^T + \\ & \left[\alpha_{11} \ \alpha_{12} \ \alpha_{14} \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ \alpha_{16} \right] \times \left[G_{C_2H_4} \ G_{H_2O} \ T_1 \ Q \ q \cdot S \cdot T_6 \cdot 1 \right]^T = 0. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Таким чином, ми одержали перші рядки еквівалентних матриць перетворення $[C_1]$ і $[B_1]$. Аналогічно заповнюються матриці $[C_2]$ і $[B_2]$. Якщо число вихідних перемінних ХТС невелике, причому вони є вихідними змінними того ж самого блоку, то матриці $[C_2]$ і $[B_2]$ можна не будувати. У цьому випадку вектор Y обчислюється за математичною моделлю вихідного елемента ХТС (наприклад, див. (3.37)).

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

$$\begin{bmatrix} L \\ T_T \\ C_{C_2H_5OH} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{31} & f_{32} & f_{33} & f_{34} & f_{35} & f_{36} & f_{37} & f_{38} & f_{39} \\ f_{41} & f_{42} & f_{43} & f_{44} & f_{45} & f_{46} & f_{47} & f_{48} & f_{49} \\ f_{51} & f_{52} & f_{53} & f_{54} & f_{55} & f_{56} & f_{57} & f_{58} & f_{59} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G_p \\ \bar{C}_{H_2O} \\ \bar{C}_{C_4H_4} \\ \bar{C}_{C_2H_5OH} \\ T_5 \\ q \\ S \\ T_6 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.37)$$

Розірвемо зворотні зв'язки в комплексі (тобто в сукупності апаратів, що розраховуються спільно) і таким чином перетворимо замкнуту ХТС у розімкнуту. Припустимо, що будь-який потік розглянутого комплексу можна представити у вигляді:

$$X_i = \sum_{j=1}^t C_{ji} Z_j + Z_{0i}, \quad (3.38)$$

де X_i – вектор i -го потоку; Z_j – вектор j -го розірваного потоку; C_{ji} – матриця розкладання i -го потоку по j -му потоці; Z_{0i} – вектор вільних членів розкладання; t – число розірваних потоків у комплексі.

Для будь-якого елемента ХТС, що входить у комплекс, рівняння перетворення вхідних потоків X_i у вихідний потік Y_k має вигляд:

$$Y_k = \sum_{i=1}^n A_{ki} X_i + X_{k0}, \quad (3.39)$$

де A_{ki} – матриця перетворення i -го вхідного потоку в k -ий вихідний потік; X_{k0} – вектор перетворення; n – число вхідних в апарат потоків.

Тоді можна знайти вид розкладання вихідного потоку через вектори параметрів стану розірваних потоків.

Підставимо (3.38) у (3.39):

$$\begin{aligned} Y_k &= \sum_{i=1}^n A_{ki} X_i + X_{k0} = \sum_{i=1}^n A_{ki} \left(\sum_{j=1}^t C_{ji} Z_j + Z_{0i} \right) + X_{k0} = \\ &= \sum_{i=1}^n \left(A_{ki} \sum_{j=1}^t C_{ji} Z_j + A_{ki} Z_{0i} \right) + X_{k0} = \sum_{i=1}^n \left(\sum_{j=1}^t A_{ki} C_{ji} Z_j + A_{ki} Z_{0i} \right) + X_{k0} = \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^t A_{ki} C_{ji} Z_j + \sum_{i=1}^n A_{ki} Z_{0i} + X_{k0} = \sum_{j=1}^t \sum_{i=1}^n A_{ki} C_{ji} Z_j + \sum_{i=1}^n A_{ki} Z_{0i} + X_{k0} = \end{aligned}$$

$$= \sum_{j=1}^t \left(\sum_{i=1}^n A_{ki} C_{ji} \right) Z_j + \left(\sum_{i=1}^n A_{ki} Z_{0i} + X_{k0} \right) = \sum_{j=1}^t C_{jk} Z_j + Z_{0k}. \quad (3.40)$$

Тут

$$C_{jk} = \sum_{i=1}^n A_{ki} C_{ji} \quad (3.40a)$$

і

$$Z_{0k} = \sum_{i=1}^n A_{ki} Z_{0i} + X_{k0} \quad (3.40b)$$

матриця розкладання k -го потоку по j -му потоці і вектор вільних членів розкладання k -го потоку.

Якщо відомі матриці перетворення окремих елементів ХТС A_{ki} , матриці розкладання вхідних потоків C_{ji} , вектори вільних членів розкладання вхідних потоків Z_{0i} і вектор перетворення X_{k0} , то можна обчислити матриці розкладання вихідних потоків C_{jk} і вектори вільних членів розкладання Z_{0k} .

Нехай відомі вхідні потоки комплексу. Тоді для кожного з них вектор вільних членів розкладання дорівнює векторові параметрів стану потоків, а матриці розкладання по векторах параметрів розірваних потоків – нульові (параметри вхідних у комплекс потоків не залежать від параметрів розірваних потоків).

Матриця розкладання будь-якого розірваного потоку після розриву по будь-якому іншому розірваному потоці буде нульова, матриця розкладання потоку самого по собі – одинична, а вектор вільних членів – нульовий. Це впливає з рівняння (тотожності) $\bar{Z}_1 = \bar{Z}_1$, де \bar{Z}_1 – вектор l -го розірваного потоку після розриву

$$\bar{Z}_1 = \sum_{j=1, j \neq l}^t 0 \cdot \bar{Z}_j + E \bar{Z}_1 + 0, \quad (3.41)$$

де E – одинична матриця.

Цієї інформації досить для розрахунку матриць розкладання і векторів вільних членів розкладання всіх потоків, що виходять з апаратів комплексу, у тому числі і розірваних потоків до місця розриву, $\bar{\bar{Z}}_1$, тобто

$$\bar{\bar{Z}}_1 = \sum_{j=1}^t C_{j1} \bar{Z}_j + \bar{\bar{Z}}_{01}. \quad (3.42)$$

Але параметри стану потоків до і після розриву повинні бути рівні, тобто

$$\bar{\bar{Z}}_1 = \bar{Z}_1 \quad (3.43)$$

або

$$\sum_{j=1}^t C_{jl} \bar{Z}_j + \bar{Z}_{01} = \sum_{j=1, j \neq 1}^t 0 \cdot \bar{Z}_j + E \bar{Z}_1 + 0, \quad (3.44)$$

звідки

$$\sum_{j=1, j \neq 1}^t C_{jl} \bar{Z}_j + (C_{11} - E) \bar{Z}_1 = -\bar{Z}_{01}. \quad (3.45)$$

Усього рівнянь типу (3.45) буде стільки, скільки мається розірваних потоків, тобто t . Тому виходить система лінійних алгебраїчних рівнянь, що може бути легко вирішена. При цьому будуть знайдені вектори параметрів стану розірваних потоків. Оскільки при обчисленні матриць розкладання, що входять у рівняння типу (3.45), були обчислені матриці розкладання всіх інших потоків, то, підставляючи ці матриці і знайдені значення параметрів розірваних потоків у рівності (3.38), одержимо параметри всіх інших потоків.

Прийоми складання матриць перетворення і розкладання розглянемо на прикладі системи абсорбційно-десорбційного очищення синтез-газу від оксиду вуглецю (IV) розчином моноетаноламіна (рис. 3.6).

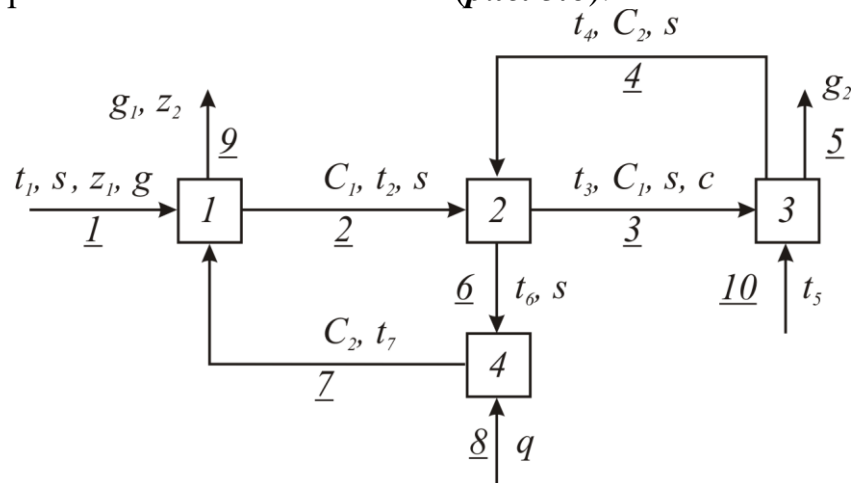


Рис. 3.6. Блок-схема системи моноетаноламінового очищення синтез-газу від оксиду вуглецю (IV): 1 – абсорбер; 2 – теплообмінник; 3 – регенератор; 4 – холодильник

Математичні моделі елементів ХТС мають такий вигляд:
абсорбер (1) –

$$\begin{bmatrix} z_2 \\ t_2 \\ C_1 \\ g_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} & a_{16} & a_{17} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} & a_{26} & a_{27} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} & a_{35} & a_{36} & a_{37} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & a_{45} & a_{46} & a_{47} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} g \\ Z_1 \\ t_1 \\ s \\ t_7 \\ C_2 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.46)$$

теплообмінник (2) –

$$\begin{bmatrix} t_3 \\ t_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} s \\ t_2 \\ t_4 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.47)$$

регенератор (3) –

$$\begin{bmatrix} t_4 \\ C_2 \\ g_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & b_{14} & b_{15} & b_{16} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & b_{24} & b_{25} & b_{26} \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & b_{34} & b_{35} & b_{36} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} s \\ C \\ C_1 \\ t_3 \\ t_5 \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.48)$$

холодильник (4) –

$$[t_7] = [f_{11} f_{12} f_{13} f_{14}] \times \begin{bmatrix} q \\ t_6 \\ s \\ 1 \end{bmatrix} \quad (3.49)$$

Тут g – витрата газу, що очищається; s – кратність циркуляції; C – концентрація абсорбенту; C_1 і C_2 – концентрації активної частини абсорбенту в насиченому і регенованому розчині; z_1, z_2 – концентрації газу на вході в абсорбер і на виході з нього; g_1 і g_2 – втрати абсорбенту в абсорбері і десорбері; t_5 – температура пару; t_1-t_4, t_6, t_7 – температури відповідних потоків розчину абсорбенту; q – кількість теплоти, що відводиться охолодною водою.

Позначимо вектори параметрів потоків через Y_i :

$$\begin{aligned} Y_1 &= \{ z_1, g, t_1 \} & Y_2 &= \{ C_1, t_2 \} \\ Y_3 &= \{ t_3, C_1 \} & Y_4 &= \{ t_4, C_2 \} \\ Y_5 &= \{ g_2 \} & Y_6 &= \{ t_6, C_2 \} \\ Y_7 &= \{ C_2, t_7 \} & Y_8 &= \{ q \} \\ Y_9 &= \{ g_1, z_2 \} & Y_{10} &= \{ t_5 \}. \end{aligned}$$

Величини s і C нам відомі перед розрахунком, тому для зручності не будемо їх включати в Y_i . Для проведення розрахунку розірвемо потоки 2 і 4. Тоді як вектори розкладання Z_1 і Z_2 варто прийняти вектори Y_2 і Y_4 , $Z_1=Y_2$, $Z_2=Y_4$.

Послідовність розрахунку елементів ХТС буде: 2, 3, 4, 1. Відповідно до (3.39) математичні моделі елементів ХТС (3.46–3.49) перепишемо в наступному виді:

ТЕПЛООБМІННИК –

$$\underbrace{\begin{bmatrix} t_6 \\ C_2 \end{bmatrix}}_{Y_6} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & d_{22} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}}_{A_{62}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} C_1 \\ t_2 \end{bmatrix}}_{Y_2} + \underbrace{\begin{bmatrix} d_{23} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{A_{64}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} t_4 \\ C_2 \end{bmatrix}}_{Y_4} + \underbrace{\begin{bmatrix} d_{21}s + d_{24} \\ 0 \end{bmatrix}}_{X_{60}}$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} t_3 \\ C_1 \end{bmatrix}}_{Y_3} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & d_{12} \\ 1 & 0 \end{bmatrix}}_{A_{32}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} C_1 \\ t_2 \end{bmatrix}}_{Y_2} + \underbrace{\begin{bmatrix} d_{13} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}}_{A_{34}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} t_4 \\ C_2 \end{bmatrix}}_{Y_4} + \underbrace{\begin{bmatrix} d_{11}s + d_{14} \\ 0 \end{bmatrix}}_{X_{30}}$$

РЕГЕНЕРАТОР –

$$\underbrace{\begin{bmatrix} t_4 \\ C_2 \end{bmatrix}}_{Y_4} = \underbrace{\begin{bmatrix} b_{14} & b_{13} \\ b_{24} & b_{23} \end{bmatrix}}_{A_{43}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} t_3 \\ C_1 \end{bmatrix}}_{Y_3} + \underbrace{\begin{bmatrix} b_{15} \\ b_{25} \end{bmatrix}}_{A_{4,10}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} t_5 \\ Y_{10} \end{bmatrix}}_{Y_{10}} + \underbrace{\begin{bmatrix} b_{11}s + b_{12}C + b_{16} \\ b_{21}s + b_{22}C + b_{26} \end{bmatrix}}_{X_{40}}$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} q_1 \end{bmatrix}}_{Y_5} = \underbrace{\begin{bmatrix} b_{34} & b_{33} \end{bmatrix}}_{A_{53}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} t_3 \\ C_1 \end{bmatrix}}_{Y_3} + \underbrace{\begin{bmatrix} b_{35} \end{bmatrix}}_{A_{5,10}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} t_5 \\ Y_{10} \end{bmatrix}}_{Y_{10}} + \underbrace{\begin{bmatrix} b_{31}s + b_{32}C + b_{36} \end{bmatrix}}_{X_{50}}$$

ХОЛОДИЛЬНИК –

$$\underbrace{\begin{bmatrix} C_2 \\ t_7 \end{bmatrix}}_{Y_7} = \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ f_{12} & 0 \end{bmatrix}}_{A_{76}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} t_6 \\ C_2 \end{bmatrix}}_{Y_6} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ f_{11} \end{bmatrix}}_{A_{78}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} q \\ Y_8 \end{bmatrix}}_{Y_8} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 \\ f_{13}s + f_{14} \end{bmatrix}}_{X_{70}}$$

АБСОРБЕР –

$$\underbrace{\begin{bmatrix} C_1 \\ t_2 \end{bmatrix}}_{Y_2} = \underbrace{\begin{bmatrix} a_{32} & a_{31} & a_{33} \\ a_{22} & a_{21} & a_{23} \end{bmatrix}}_{A_{21}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} z_1 \\ g \\ t_1 \end{bmatrix}}_{Y_1} + \underbrace{\begin{bmatrix} a_{36} & a_{35} \\ a_{26} & a_{25} \end{bmatrix}}_{A_{27}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} C_2 \\ t_7 \end{bmatrix}}_{Y_7} + \underbrace{\begin{bmatrix} a_{34}s + a_{37} \\ a_{24}s + a_{27} \end{bmatrix}}_{X_{20}}$$

$$\underbrace{\begin{bmatrix} g_1 \\ z_2 \end{bmatrix}}_{Y_9} = \underbrace{\begin{bmatrix} a_{42} & a_{41} & a_{43} \\ a_{12} & a_{11} & a_{13} \end{bmatrix}}_{A_{91}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} z_1 \\ g \\ t_1 \end{bmatrix}}_{Y_1} + \underbrace{\begin{bmatrix} a_{46} & a_{45} \\ a_{16} & a_{15} \end{bmatrix}}_{A_{97}} \times \underbrace{\begin{bmatrix} C_2 \\ t_7 \end{bmatrix}}_{Y_7} + \underbrace{\begin{bmatrix} a_{44}s + a_{47} \\ a_{14}s + a_{17} \end{bmatrix}}_{X_{90}}$$

Тому що як розкладання обрані вектори Y_2 і Y_4 (Z_1 і Z_2), то ми можемо написати:

$$Y_i = \sum_{j=1}^t C_{ji} Z_j + Z_{0i}; \quad i=2,4; \quad j=1,2 \quad (3.50)$$

$$Y_2 = C_{12} Z_1 + C_{22} Z_2 + Z_{02} = E Z_1 + 0 \cdot Z_2 + 0;$$

$$C_{12} = E; \quad C_{22} = 0; \quad Z_{02} = 0 \quad (3.51)$$

$$Y_4 = C_{14}Z_1 + C_{24}Z_2 + Z_{04} = 0 \cdot Z_1 + EZ_2 + 0;$$

$$C_{14} = 0; \quad C_{24} = E; \quad Z_{04} = 0 \quad (3.52)$$

$$Y_6 = C_{16}Z_1 + C_{26}Z_2 + Z_{06} = A_{62}Y_2 + A_{64}Y_4 + X_{60};$$

$$C_{16} = A_{62}; \quad C_{26} = A_{64}; \quad Z_{06} = X_{60} \quad (3.53)$$

$$Y_3 = C_{13}Z_1 + C_{23}Z_2 + Z_{03} = A_{32}Y_2 + A_{34}Y_4 + X_{30};$$

$$C_{13} = A_{32}; \quad C_{23} = A_{34}; \quad Z_{03} = X_{30} \quad (3.54)$$

$$Y_4 = C_{14}Z_1 + C_{24}Z_2 + Z_{04} = A_{43}Y_3 + A_{4,10}Y_{10} + X_{40} = A_{43}(C_{13}Z_1 + C_{23}Z_2 + Z_{03}) +$$

$$+ A_{4,10}Y_{10} + X_{40} = A_{43}C_{13}Z_1 + A_{43}C_{23}Z_2 + A_{43}Z_{03} + A_{4,10}Y_{10} + X_{40};$$

$$C_{14} = A_{43}C_{13}; \quad C_{24} = A_{43}C_{23}; \quad Z_{04} = A_{43}Z_{03} + A_{4,10}Y_{10} + X_{40} \quad (3.55)$$

$$Y_5 = C_{15}Z_1 + C_{25}Z_2 + Z_{05} = A_{53}Y_3 + A_{5,10}Y_{10} + X_{50} = A_{53}(C_{13}Z_1 + C_{23}Z_2 + Z_{03}) +$$

$$+ A_{5,10}Y_{10} + X_{50} = A_{53}C_{13}Z_1 + A_{53}C_{23}Z_2 + A_{53}Z_{03} + A_{5,10}Y_{10} + X_{50};$$

$$C_{15} = A_{53}C_{13}; \quad C_{25} = A_{53}C_{23}; \quad Z_{05} = A_{53}Z_{03} + A_{5,10}Y_{10} + X_{50} \quad (3.56)$$

$$Y_7 = C_{17}Z_1 + C_{27}Z_2 + Z_{07} = A_{76}Y_6 + A_{78}Y_8 + X_{70} = A_{76}(C_{16}Z_1 + C_{26}Z_2 + Z_{06}) +$$

$$+ A_{78}Y_8 + X_{70} = A_{76}C_{16}Z_1 + A_{76}C_{26}Z_2 + A_{76}Z_{06} + A_{78}Y_8 + X_{70};$$

$$C_{17} = A_{76}C_{16}; \quad C_{27} = A_{76}C_{26}; \quad Z_{07} = A_{76}Z_{06} + A_{78}Y_8 + X_{70} \quad (3.57)$$

$$Y_2 = C_{12}Z_1 + C_{22}Z_2 + Z_{02} = A_{21}Y_1 + A_{27}Y_7 + X_{20} = A_{21}Y_1 + A_{27}(C_{17}Z_1 + C_{27}Z_2 +$$

$$+ Z_{07}) + X_{20} = A_{21}Y_1 + A_{27}C_{17}Z_1 + A_{27}C_{27}Z_2 + A_{27}Z_{07} + X_{20};$$

$$C_{12} = A_{27}C_{17}; \quad C_{22} = A_{27}C_{27}; \quad Z_{02} = A_{21}Y_1 + A_{27}Z_{07} + X_{20} \quad (3.58)$$

$$Y_9 = C_{19}Z_1 + C_{29}Z_2 + Z_{09} = A_{91}Y_1 + A_{97}Y_7 + X_{90} = A_{91}Y_1 + A_{97}(C_{17}Z_1 + C_{27}Z_2 +$$

$$+ Z_{07}) + X_{90} = A_{91}Y_1 + A_{97}C_{17}Z_1 + A_{97}C_{27}Z_2 + A_{97}Z_{07} + X_{90};$$

$$C_{19} = A_{97}C_{17}; \quad C_{29} = A_{97}C_{27}; \quad Z_{09} = A_{91}Y_1 + A_{97}Z_{07} + X_{90}. \quad (3.59)$$

Таким чином, розглядаючи в послідовності розрахунку всі апарати, ми визначаємо всі матриці розкладання C і вектори розкладання Z . Параметри потоків 2 і 4 до і після розривів повинні бути однакові, тому, використовуючи вирази (3.51), (3.52), (3.54), (3.58), складаємо системи рівнянь:

$$\begin{cases} Z_1 = C_{12}Z_1 + C_{22}Z_2 + Z_{02} \\ Z_2 = C_{14}Z_1 + C_{24}Z_2 + Z_{04} \end{cases} \quad (3.60)$$

або

$$\begin{cases} (C_{12} - E)Z_1 + C_{22}Z_2 = -Z_{02} \\ C_{14}Z_1 + (C_{24} - E)Z_2 = -Z_{04} \end{cases} \quad (3.61)$$

У результаті рішення системи лінійних рівнянь (3.61) одержуємо значення параметрів векторів Z_1 і Z_2 , а потім за формулами (3.53) – (3.59) знаходимо параметри стану всіх інших потоків.

3.7. ПРИКЛАДИ ЗАДАЧ

3.7.1. Матеріальні розрахунки хіміко-технологічних схем

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Зробити розрахунки матеріальних потоків схеми установки одержання формаліну (37%) та визначити залежність видаткового коефіцієнта від параметрів процесу.

ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

Під хіміко-технологічною системою (ХТС) розуміють сукупність апаратів, взаємозв'язаних технологічними потоками і діючих як одне ціле.

Відмінна риса сучасних ХТС – велика кількість зовнішніх і внутрішніх зв'язків, у тому числі і зворотних (рециклічних), що обумовлені необхідністю більш повного використання сировини, енергії і виключення шкідливого впливу на навколишнє середовище. Як елементи ХТС, як правило, виділяють окремі апарати і машини, що виконують задану функцію, і в даному проведеному дослідженні є неподільними.

Усі методи розрахунків ХТС можна поділити на 3 групи:

- 1) метод послідовного рахунку;
- 2) метод рівнобіжного рахунку;
- 3) метод паралельно-послідовного рахунку є комбінацією перших двох методів і використовується, в основному, для розрахунку ХТС із рециклами.

При цьому математичні моделі елементів ХТС розраховуються послідовно. Знаючи параметри входу і виходу з апарата, визначають коефіцієнти лінійної залежності вихідних параметрів елемента ХТС від вхідних

параметрів для представлення опису елементів ХТС у виді лінійних моделей. Система лінійних рівнянь розраховується відразу і точно (рівнобіжний рахунок). Таким чином виходить нове наближення для рециклічних потоків і починається новий цикл розрахунків до досягнення заданої точності.

У цьому методі зменшуються помилки, що можуть накопичуватися при послідовному розрахунку ХТС. Метод простий у реалізації на ЕОМ, надійний, має швидку збіжність до рішення.

Для розрахунку ХТС не можна запропонувати один універсальний алгоритм, тому що кожна схема – це унікальна складна технічна система з визначеною структурою і з характерними зв'язками між елементами. Проте, при порівнянні технологічних схем багатотоннажних хімічних виробництв, вдається виділити загальний характерний блок, що включає обмежену кількість елементів (рис. 3.7). Такий блок можна виділити в схемах синтезу метанолу, вінілацетату, одержання формаліну й ін.

Такий підхід значно полегшив розробку алгоритмів різних схем, тому що їх удалося створювати з використанням алгоритму розрахунку основного блоку.

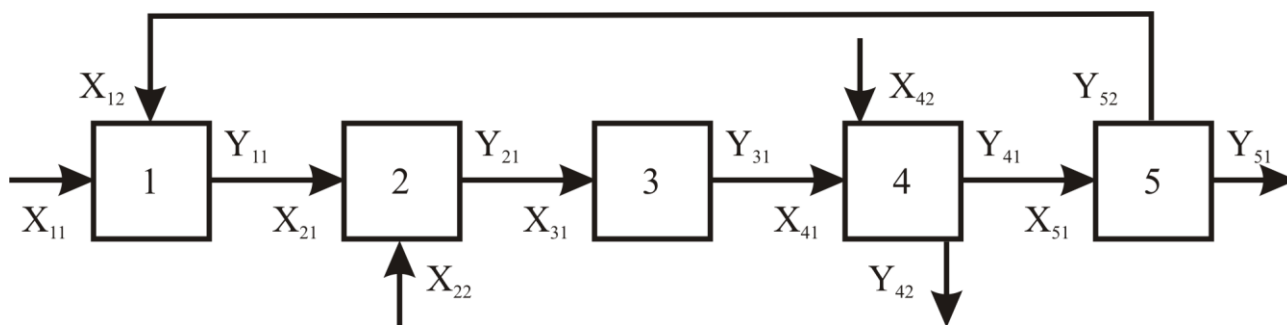


Рис. 3.7. Основний (розрахунковий) блок схеми:

1, 2 – змішувачі; 3 – реактор; 4, 5 – роздільники;

X_{ij} – вхідні потоки; Y_{ij} – вихідні потоки; i – індекс елемента (апарата);

j – порядковий номер вхідного або вихідного потоку апарата

СТРУКТУРНИЙ АНАЛІЗ СХЕМИ ОДЕРЖАННЯ ФОРМАЛІНУ

Для процесу одержання формальдегіду на залізо-молібденовому каталізаторі розрахунковий блок 3 – це реактор окислення метанолу.

Відповідно до методики складання алгоритмів і програм автоматизованого розрахунку замкнутих ХТС, що наведена у розділі 2.2, необхідно вирішувати такі основні задачі структурного аналізу:

- виділення комплексів;
- визначення попереднього порядку розрахунку елементів ХТС;
- визначення для кожного комплексу оптимальної множини дуг, розрив яких перетворить відповідний комплекс у розімкнуту ХТС і яка при цьому має найменшу сумарну параметричність;
- визначення послідовності розрахунку розімкнутого комплексу;
- визначення остаточної послідовності розрахунку ХТС.

Виконаємо ці етапи для даної технологічної схеми.

Представимо структуру ХТС, використовуючи теорію графів (рис. 3.8).

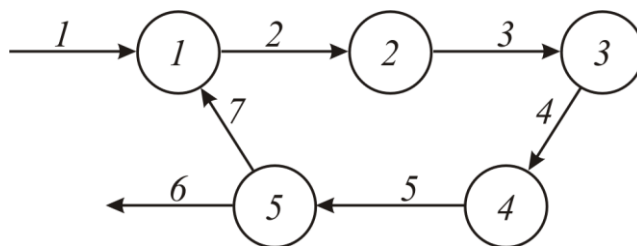


Рис. 3.8. Граф процесу

Виділення комплексів ХТС роблять за допомогою матриці шляхів [P].

i	j				
	1	2	3	4	5
1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	1
3	1	1	1	1	1
4	1	1	1	1	1
5	1	1	1	1	1

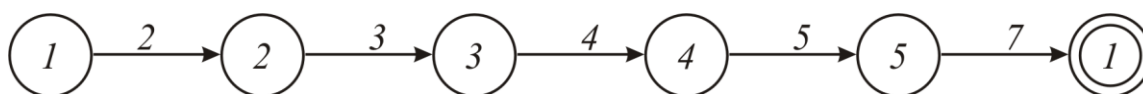
На підставі матриці шляхів складаємо допоміжну матрицю [S].

i	j				
	1	2	3	4	5
1	1	1	1	1	1
2	1	1	1	1	1
3	1	1	1	1	1
4	1	1	1	1	1
5	1	1	1	1	1

З аналізу допоміжної матриці виділяємо 1 комплекс, тому що всі рядки матриці S однакові.

$$K1 = (1, 2, 3, 4, 5).$$

Для виділення контурів вхідних до складу комплексу будуємо «прадерево» комплексу.



З прадерева виділяємо 1 контур (1, 2, 3, 4, 5).

Для визначення оптимально-розриваючої множини дуг (ОРМД) будемо матрицю контурів.

		Номер дуги						
		1	2	3	4	5	6	7
Номер контуру	1	0	1	1	1	1	0	1
Ступінь контурності	f	0	1	1	1	1	0	1

При виборі місць розриву враховується ступінь контурності (у скільки контурів входить дана дуга) і параметричність даної дуги (число параметрів, що описують даний потік). Оскільки в схемі існує єдиний контур, то ступінь контурності для всіх дуг дорівнює 1.

Розглянемо параметричність кожного потоку. У число параметрів, що визначає кожен технологічний потік у даній схемі, входять мольні потоки компонентів. У *табл. 3.1* для відповідних потоків знаком «+» відзначені ті параметри, що визначають даний потік.

Таблиця 3.1

Визначення параметричності потоків

Параметр	Номер потоку				
	1	2	3	4	5
Мольний потік метанолу		+	+		
Мольний потік кисню	+	+	+	+	+
Мольний потік азоту	+	+	+	+	+
Мольний потік пару води	+	+	+	+	+
Мольний потік формальдегіду			+		
Мольний потік оксиду вуглецю	+	+	+	+	+
Параметричність	4	5	6	4	4

Як впливає з *табл. 3.1*, найменша параметричність у потоків 1, 4 і 5, тобто можна розривати або потік 1, або потік 4, або потік 5. Вибираємо для розриву потік 5. Тоді розрахункова схема з ітераційним блоком буде мати наступний вид (*рис. 3.9*):

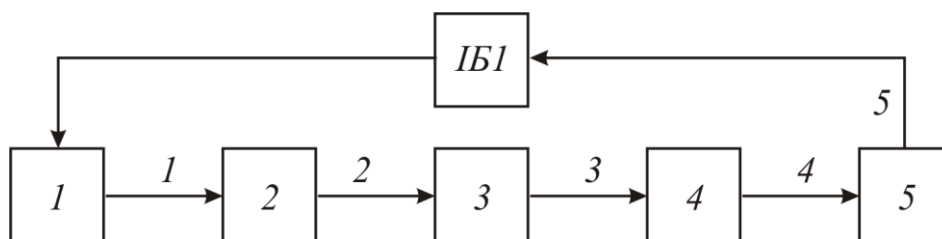


Рис. 3.9. Розрахункова схема з ітераційним блоком

Для визначення ОПРС будемо розширену таблицю зв'язків (*табл. 3.2*).

Таблиця 3.2

Визначення ВПРС

Вершина графу	Негативно-інцидентні вершини	Кількість невідомих входів в елемент на k-ому кроці роботи алгоритму				
		0	1	2	3	4
1	ІБ1	0	0	0	0	0
2	1	1	0	0	0	0
3	2	1	1	0	0	0
4	3	1	1	1	0	0
5	4	1	1	1	1	0

Отже, обчислювальна послідовність розрахунку схеми має наступний вид:

$$\text{ОПРС: } [\text{ІБ1}, 1, 2, 3, 4, 5].$$

Після визначення обчислювальної послідовності можливо приступати до розрахунку схеми.

ОПИС ПРОГРАМИ РОЗРАХУНКІВ

Для розрахунку матеріальних потоків циклічної схеми основного блоку установки одержання формаліну методом послідовно-рівнобіжного рахунку використовується прикладна програма «СХЕМА» програмного комплексу «COMPLEX». Розрахунковими параметрами потоків є мольні потоки компонентів (*табл. 3.1*).

Перелік вхідних даних програми «СХЕМА»:

- продуктивність установки по формаліну, тис.т / рік;
- безрозмірні параметри хімічного процесу в реакторі – ступінь перетворення і селективність, частки;
- концентрації продуктів у потоці на вході в реактор для метанолу, кисню і води, моль/м³.

Означені параметри схеми є найбільш важливими, як продуктивність схеми по товарному продукту – формаліну, і зручними, бо вони зв'язані з вхідними чи розрахунковими даними попередніх розрахунків каталітичного реактора окислення метанолу (див. розділ 4). Але жодна з цих величин не є безпосередньо параметром вхідних потоків схеми. Через це у програму «СХЕМА» крім основного блоку матеріального розрахунку циклічної схеми входять додаткові блоки визначення параметрів вхідних потоків методом поступового наближення. У цих розрахунках багато разів визначаються концентрації компонентів на вході в реактор, для цього у програмі передбачені окремі блоки (підпрограми).

Спочатку розрахунок схеми виконується з орієнтованим значенням вхідного потоку метанолу, що відповідає продуктивності схеми, виходу

формальдегіду (добутку ступеня перетворення і селективності) і складу формаліну – 37-процентний розчин формальдегіду у воді з незначною кількістю метанолу. Вхідний потік повітря визначається з врахуванням співвідношення концентрації кисню і метанолу на вході у реактор. Вхідний потік води у абсорбер (X_{42}) визначається після розрахунку реактора по відомій кількості формальдегіду, що надається з реактора до абсорбера, і прийнятому складу формаліну.

При виконанні програми орієнтовані потоки метанолу і повітря методом поступового наближення змінюються таким чином, щоб концентрації кисню і метанолу на вході в реактор збігалися з заданими. При цьому визначаються значення коефіцієнту рециркуляції і концентрація води на вході в реактор. Останній параметр схеми впливає на роботу реактора, тому при значному відхиленні знайденої концентрації води від заданої треба повернутися до розрахунку реактора, щоб уточнити вхідні дані програми «СХЕМА». На цей випадок у програмі передбачено спеціальне повідомлення.

Наприкінці розрахунку перевіряється досягнута продуктивність схеми; в разі відхилення від заданої пропорційно змінюються вхідні потоки схеми і виконується остаточний цикл розрахунку.

ХАРАКТЕРИСТИКА МОДУЛІВ ЕЛЕМЕНТІВ

Програму складено з використанням спрощених лінійних моделей елементів. Коефіцієнти математичних моделей використовуються як константи і при розрахунках не змінюються.

Структура параметрів стану потоків – мольні витрати окремих компонентів: метанолу, кисню, азоту, води, формальдегіду, оксиду вуглецю ($n_k = 6$).

Змішувач потоків (елементи 1,2)

Лінійна математична модель змішувача має наступний вид:

$$F_{j_{\text{вих}}} = \sum_{i=1}^n F_{j_{\text{вх}i}}, \quad (3.62)$$

де j – індекс компоненту за вище визначеною послідовністю, $j = 1, 2, \dots, n_k$; $F_{j_{\text{вих}}}$, $F_{j_{\text{вх}}}$ – витрати компонентів вихідного і вхідних потоків; n – число вхідних потоків (завжди дорівнює двом).

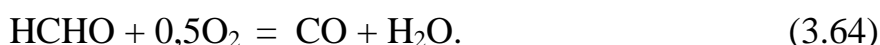
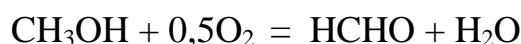
Реактор окислювання (елемент 3)

Математична стехіометрична модель реактора має наступний вид:

$$F_{j_{\text{вих}}} = F_{j_{\text{вх}}} - \left(\frac{v_{1,j}}{v_{1,1}} F_{\text{мвх}} \cdot X \cdot S + \frac{v_{2,j}}{v_{2,1}} F_{\text{мвх}} \cdot X \cdot (1 - S) \right). \quad (3.63)$$

Тут X – ступень перетворення метанолу, долі; S – селективність створення формальдегіду, долі; $v_{1,j}$, $v_{2,j}$ – елементи стехіометричної матриці для

компонентів у двох стехіометричних реакціях створення формальдегіду і оксиду вуглецю:



Стехіометрична матриця з визначеною послідовністю компонентів

$$A = \begin{bmatrix} -1 & -0,5 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ -1 & -0,5 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.65)$$

Абсорбер (елемент 4)

Математична модель абсорбера може бути представлена в наступному виді:

$$F_{j,\text{вих}}^{\Gamma} = (1 - \beta)F_{j,\text{вх}}^{\Gamma};$$

$$F_{j,\text{вих}}^{\text{P}} = \beta \cdot F_{j,\text{вх}}^{\Gamma}. \quad (3.66)$$

Тут β – ступінь абсорбції, що прийнята для компонентів (зі вказаною послідовністю) рівною 1, 0, 0, 0, 1, 0; індекси Γ і P відносяться до газу і рідини.

Кількість води у вихідних потоках уточнюється з врахуванням 100% вологості газового потоку (Y_{41}) при температурі 20°C.

Подільник потоків (елемент 5)

Витрати компонентів у потоках Y_{51} і Y_{52} визначають з врахуванням коефіцієнта розподілу (R) у схемі:

$$F_{j,\text{вих}}^{(Y_{52})} = F_{j,\text{вх}} \cdot R;$$

$$F_{j,\text{вих}}^{(Y_{51})} = F_{j,\text{вх}} \cdot (1 - R). \quad (3.67)$$

Коефіцієнт розподілу зв'язаний з коефіцієнтом рециркуляції схеми.

Лістинг програми «СХЕМА» приведений у додатку 3.

НАВЧАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

- 1) Використовуючи прикладну програму «ТРУБЧАСТИЙ РЕАКТОР» програмного комплексу «COMPLEX» (опис та методика розрахунків наведені у гл. 4), виконати розрахунок трубчастого реактора для процесу окислювання метанолу у формальдегід за початковими даними, приведеними у таблицях 3.3–3.5. Для обраного режиму вибрати ті значення часу контакту, для яких величина ступеня перетворення більше 0,83 (число точок повинно бути не менш 7).

- 2) Виконати матеріальні розрахунки схеми установки одержання формаліну для всіх обраних варіантів у пункті 1 при постійній продуктивності та вибрати базовий варіант при $x = 0,975 \pm 0,05$.
- 3) Скласти таблиці матеріального балансу апаратів – реактора, абсорбера і всієї установки для базового варіанта.
- 4) Виконати матеріальні розрахунки схеми одержання формаліну за даними базового варіанта при варіюванні величини продуктивності на $\pm 50\%$.
- 5) Визначити залежність видаткового коефіцієнта по метанолу (кг метанолу / т формаліну) для схеми з трубчастим реактором від:
 - продуктивності установки (вихід = const);
 - характеристик хімічного процесу в реакторі – ступеня перетворення і селективності (продуктивність = const).
- 6) Побудувати графіки залежностей:
 - зміни температури, ступеня перетворення і селективності від часу контакту для реактора в цілому;
 - видаткового коефіцієнта від продуктивності установки (вихід = const) і від виходу (продуктивність = const).

Таблиця 3.3

Початкові дані, загальні для усіх варіантів

Температура паро-газової суміші на вході в реактор	160–190°C
Гранична допустима температура у трубках	365±2°C
Ступінь перетворення метанолу на виході з реактора	0,98
Пористість шару каталізатора в трубках	0,41
Діапазон зміни температур теплоносія в міжтрубному просторі, що рекомендується	(220 – 290)°C
Припустимий діапазон зміни швидкості газу в трубках	(1,3 – 2,2) м/с
Припустимий гідравлічний опір реактора	0,03 МПа

Таблиця 3.4

Початкові дані

№ вар.	Продуктивність тис.т/рік	Склад вхідної суміші (умовне позначення концентрацій)				Внутрішній діаметр трубки, м	Діапазон температури холодоагенту, °C
		Метанол	Формальдегід	Вода	Кисень		
1	10	М1	Ф1	В3	К1	0,020	240 – 285
2	22	М2	Ф3	В1	К3	0,022	235 – 275
3	35	М1	Ф2	В3	К1	0,024	230 – 270
4	52	М2	Ф1	В1	К3	0,027	225 – 265
5	41	М1	Ф3	В3	К2	0,030	220 – 260
6	36	М2	Ф1	В3	К3	0,024	230 – 280

Продовження таблиці 3.4

№ вар.	Продуктивність тис.т/рік	Склад вхідної суміші (умовне позначення концентрацій)				Внутрішній діаметр трубки, м	Діапазон температури холодоагенту, °С
		Метанол	Формальдегід	Вода	Кисень		
7	20	М1	Ф2	В1	К2	0,027	220 – 270
8	15	М2	Ф2	В3	К2	0,021	235 – 280
9	22	М1	Ф1	В2	К1	0,022	235 – 290
10	60	М2	Ф3	В3	К1	0,024	235 – 275
11	40	М1	Ф3	В2	К3	0,027	220 – 270
12	20	М2	Ф2	В3	К1	0,030	220 – 260
13	32	М1	Ф1	В3	К2	0,024	230 – 280
14	14	М2	Ф3	В2	К3	0,027	220 – 270
15	55	М1	Ф2	В3	К2	0,021	235 – 280
16	10	М2	Ф2	В2	К2	0,022	225 – 280
17	22	М3	Ф1	В1	К1	0,024	235 – 275
18	35	М1	Ф3	В2	К3	0,018	240 – 290
19	52	М3	Ф3	В1	К1	0,020	230 – 280
20	41	М1	Ф2	В2	К3	0,022	230 – 290
21	36	М3	Ф1	В1	К3	0,024	230 – 280
22	20	М1	Ф3	В1	К2	0,026	220 – 280
23	15	М3	Ф3	В1	К3	0,018	240 – 290
24	22	М1	Ф1	В3	К1	0,022	230 – 280
25	60	М3	Ф1	В3	К2	0,021	230 – 280
26	40	М2	Ф2	В1	К3	0,024	235 – 285
27	20	М1	Ф3	В2	К3	0,025	235 – 275
28	32	М3	Ф3	В1	К3	0,028	230 – 270
29	14	М1	Ф1	В3	К1	0,022	225 – 270
30	55	М3	Ф2	В3	К1	0,026	220 – 265

Таблиця 3.5

Значення концентрацій компонентів на вході в реактор (моль/м³)

Компонент	Умовне позначення концентрації компонента		
Метанол	М1=2,6	М2=2,8	М3=3,0
Формальдегід	Ф1=0,4	Ф2=0,2	Ф3=0,0
Кисень	К1=3,5	К2=3,7	К3=3,9
Вода	В1=1,0	В2=1,4	В3=1,2

НАВЧАЛЬНИЙ ПРИКЛАД

Зробити розрахунки матеріальних потоків схеми установки одержання формаліну та визначити залежність видаткового коефіцієнта від параметрів процесу для наступних даних:

– температура суміші на вході в реактор, °С	170;
– температура холодоагенту, °С	260 – 280;
– концентрація компонентів на вході в реактор, моль/м ³ :	
метанолу –	2,80;
формальдегіду –	0,0;
води –	0,620;
кисню –	4,00;
– внутрішній діаметр трубки, мм	21;
– продуктивність, т/рік	30000

Початкові дані, загальні для усіх варіантів, наведені у табл. 3.3.

Обираємо діаметр зерна каталізатора в трубчастій частині 5 мм. Співвідношення $4 \leq D_{\text{тр}}/D_z \leq 6$ виконується – $d_{\text{тр}}/d_z = 4,2$.

Для вибору температури теплоносія були виконані два розрахунки при швидкості газової суміші в трубках $\omega = 1,7$ м/с для крайніх значень $T_{\text{хл}} = 260$ і 280°C . Температура «гарячої точки» для цих значень складає $T_{\text{г.т.}} = 339$ та 390°C . За графіком, побудованим в координатах $T_{\text{хл}}-T_{\text{г.т.}}$ (рис. 3.10), знаходять значення $T_{\text{хл}}$, при якому максимальна $T_{\text{г.т.}}$ приблизно дорівнює 365°C . Ця температура теплоносія дорівнює приблизно 270°C .

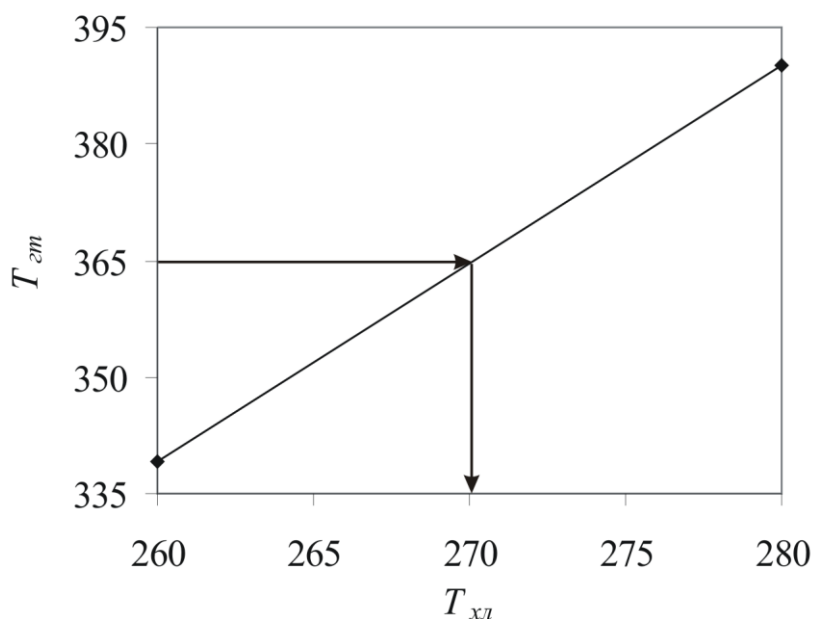


Рис. 3.10. Графік залежності температури «гарячої точки» від температури теплоносія

Результати всіх наступних розрахунків реактора представлені в табл. 3.6.

Спочатку визначають параметри трубчатого реактора при різних ступенях перетворення. Пошук ведуть за умовою $T_{\text{г.т.}} = 365 \pm 2^\circ\text{C}$, $X = 0,98$ і $\Delta p = 0,03 \pm 0,001$ МПа. Навколо знайденого значення варіювали температуру холодоагенту $T_{\text{хл}}$ таким чином, щоб підібрати таке її значення, при якому температура гарячої точки $T_{\text{г.т.}}$ не перевищувала б 365°C . Так було знайдено

варіант 5, коли при $T_{\text{хл}} = 269^{\circ}\text{C}$ значення $T_{\text{г.т.}} = 363,9^{\circ}\text{C}$. Однак, за цих умов ступінь перетворення ($X = 0,976$) нижче потрібного – 0,98. Тому необхідно збільшити час контакту. Цього можна досягти або за рахунок збільшення довжини трубки, або за рахунок зменшення лінійної швидкості. Оскільки перепад тиску в реакторі вже складає 0,03 МПа, то подальше збільшення довжини неможливо. Тому лінійна швидкість зменшується до 1,66 м/с і знову підбирається температура холодоагенту $T_{\text{хл}}$. У варіанті 6 при $T_{\text{хл}} = 268^{\circ}\text{C}$ ступінь перетворення приймає потрібне значення – 0,980, температура гарячої точки $T_{\text{г.т.}} = 363,7^{\circ}\text{C}$, інші параметри задовольняють обмеженням. Результати розрахунків наведено в **табл. 3.6**.

Таблиця 3.6

Результати розрахунків трубчастого реактора

№ вар.	ω	$T_{\text{хл}}$	$T_{\text{г.т.}}$	X	Sel	ΔP	τ_k
1	1,7	260	339,0	–	–	–	–
2	1,7	280	390,0	–	–	–	–
3	1,7	268	361,3	–	–	–	–
4	1,7	272	371,5	–	–	–	–
5	1,7	269	363,9	0,976	–	–	–
6	1,66	268	363,7	0,980	0,944	0,03	0,675

Для обраного режиму вибираємо ряд значень часу контакту, для яких величина ступеня перетворення більше 0,83 (**табл. 3.7**). Для цих даних були виконані розрахунки схеми одержання формаліну за допомогою програми «СХЕМА». В **табл. 3.7** наведені результати визначення матеріальних потоків – вхідного компонента (метанолу) X_{22} і кінцевого продукту (формаліну) Y_{42} . За отриманими даними розраховано видатковий коефіцієнт K_r (кількість кг метанолу, яка витрачається на отримання 1 тонни формаліну (**табл. 3.7**)).

Таблиця 3.7

Результати розрахунків схеми при постійній продуктивності

№ вар.	Показники процесу на виході з реактора			Показники роботи схеми окислювання метанолу		
	X , частки	Sel , частки	$X \cdot Sel$, частки	X_{22} , кг/год	Y_{42} , кг/год	K_r , кг/т
6	0,980	0,944	0,9251	1544,72	3750	411,93
6.1	0,977	0,947	0,9252	1542,65	3750	411,37
6.2	0,974	0,949	0,9243	1542,22	3750	411,26
6.3	0,971	0,951	0,9234	1541,81	3750	411,15
6.4	0,967	0,954	0,9225	1540,77	3750	410,87
6.5	0,963	0,956	0,9206	1541,35	3750	411,03
6.6	0,953	0,961	0,9158	1542,92	3750	411,45
6.7	0,936	0,966	0,9042	1551,43	3750	413,71
6.8	0,902	0,971	0,8758	1577,37	3750	420,63
6.9	0,866	0,974	0,8435	1610,02	3750	429,34

Матеріальний баланс реактора

Прихід (потік X_{31}):			Витрата (потік Y_{31}):		
Компонент	кг/год	%	Компонент	кг/год	%
Метанол	1541,81	6,27	Метанол	44,71	0,18
Кисень	2202,59	8,96	Кисень	1417,36	5,59
Азот	17658,60	82,13	Азот	17658,60	79,58
Вода	197,97	1,43	Вода	1081,35	7,58
Формальдегід	0	0	Формальдегід	1334,76	5,61
Оксид вуглецю	258,48	1,20	Оксид вуглецю	322,67	1,45
<i>Всього</i>	<i>21859,45</i>	<i>100,0</i>	<i>Всього</i>	<i>21859,45</i>	<i>100,0</i>

На *рис. 3.11* наведено графік залежності видаткового коефіцієнта від виходу формальдегіду. Видно, що при заданих умовах мінімум видаткового коефіцієнта досягається при значенні виходу 0,9225.

Приймаємо за базовий варіант 6.3. Для нього наведені розрахунки матеріальних балансів для реактора, абсорбера та схеми в цілому (*табл. 3.8 – 3.10*). Крім того, для цього варіанта було проведено розрахунки видаткового коефіцієнта при варіюванні продуктивності. Результати наведено в *табл. 3.11*.

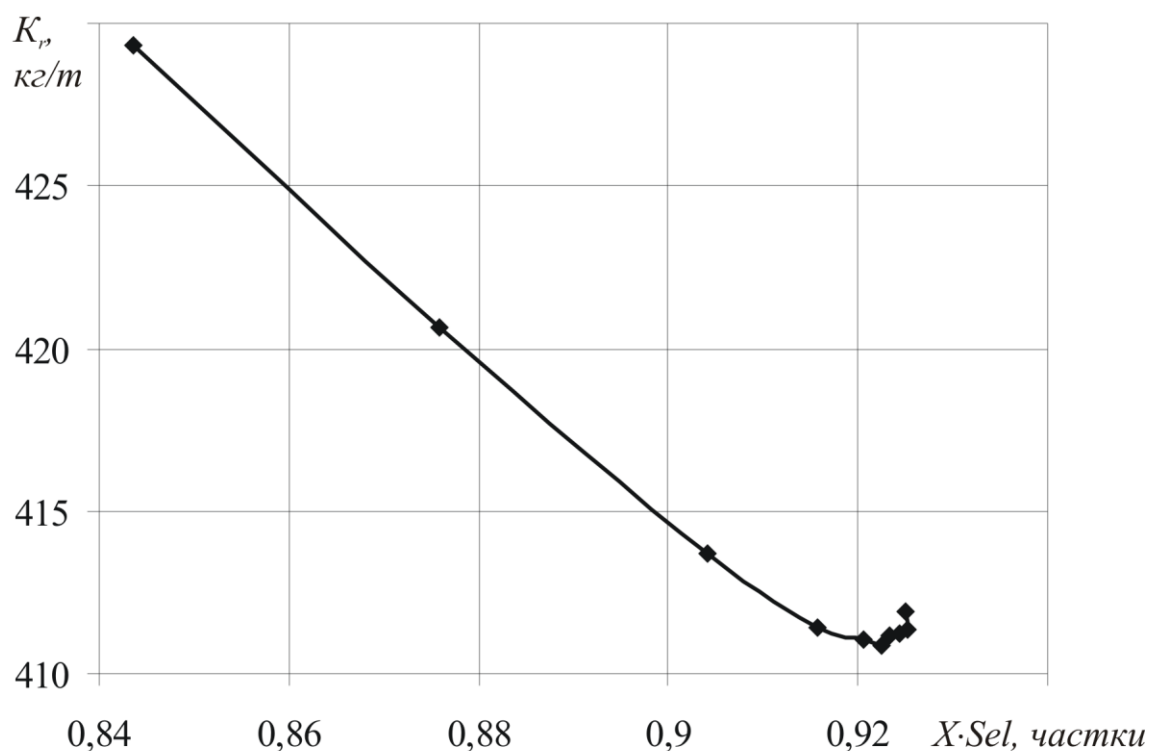


Рис. 3.11. Графік залежності видаткового коефіцієнта від виходу формальдегіду

Таблиця 3.9

Матеріальний баланс абсорбера

Прихід (кг/год)		Витрата (кг/год)	
Потік X_{41} (реакційна суміш):	21859,45	Потік Y_{42} (формалін):	3750,00
CH ₃ OH	44,71	CH ₃ OH	44,71
O ₂	1417,36	H ₂ O	2370,53
N ₂	17658,60	Φ	1334,76
H ₂ O	1081,35		
CHON	1334,76		
CO	322,67		
Потік X_{42} (вода):		Потік Y_{41} (абгази):	19645,76
H ₂ O	1536,31	CH ₃ OH	0,0
		O ₂	1417,36
		N ₂	17658,60
		H ₂ O	247,13
		CHON	0,0
		CO	322,67
Всього	23395,75	Всього	23395,76

Таблиця 3.10

Матеріальний баланс схеми

Прихід (кг/год)		Витрата (кг/год)	
Потік X_{11} (повітря):	4579,99	Потік Y_{42} (формалін):	3750,00
O ₂	1067,18	CH ₃ OH	44,71
N ₂	3512,81	H ₂ O	2370,53
		Φ	1334,76
Потік X_{22} (метанол):		Потік Y_{51} (здувка):	3908,11
CH ₃ OH	1541,81	O ₂	281,95
		N ₂	3512,81
		H ₂ O	49,16
		CO	64,19
Потік X_{42} (вода):		Потік Y_{52} (рецикл):	15737,64
H ₂ O	1536,31	O ₂	1135,41
Потік X_{12} (рецикл):	15737,64	N ₂	14145,79
O ₂	1135,41	H ₂ O	197,97
N ₂	14145,79	CO	258,48
H ₂ O	197,97		
CO	258,48		
Всього	23395,75	Всього	23395,75

Користуючись *рис. 3.6*, складемо матеріальний баланс реактора (*табл. 3.8*), абсорбера (*табл. 3.9*) та матеріальний баланс схеми (*табл. 3.10*) для базового варіанта.

Таблиця 3.11

Результати розрахунків схеми при постійному виході

№ вар.	Продуктивність, т / рік	Показники роботи схеми окислювання метанолу		
		X_{22} , кг/год	Y_{42} , кг/год	K_r , кг/т
6.3	30000	1541,81	3750	411,15
6.3.1	20000	1027,87	2500	411,148
6.3.2	40000	2055,75	5000	411,15
6.3.3	15000	770,91	1875	411,152
6.3.4	45000	2312,72	5625	411,15

Як видно з *табл. 3.11*, при постійному виході зміна продуктивності не впливає на значення видаткового коефіцієнта.

3.7.2. Розрахунок циркуляційного тракту процесу гідроочищення дизельних палив

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Використовуючи моделюючу програму з лінійними моделями апаратів розрахувати і виконати аналіз роботи циркуляційного тракту процесу гідроочищення дизельних палив.

ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

Технологічна схема приведена на *рис. 3.12*. Сировина (нафтова прямогонна фракція 140–290°C) змішується з циркуляційним газом та газом, що містить водень, і потім нагрівається в протиточних теплообмінниках 1 гарячим потоком суміші до 285–300°C. Підігріта паро-рідинна суміш розігрівається в трубчастій печі 2 до температури реакції 360–420°C і надходить у реактор 3, де сірчисті сполуки сировини гідруються з утворенням H_2S .

Крім реакцій гідрування в реакторі відбувається частковий крекінг з утворенням вуглеводного газу і легких бензинових фракцій. Суміш після реакції віддає теплоту газо-сировинній суміші в теплообмінниках 1, охолоджується в повітряних теплообмінниках 4 до 60–80°C і в водяних холодильниках 5 до 40–50°C, а потім надходить у сепаратор високого тиску 6. Із сепаратора циркуляційний газ надходить в абсорбер 7 на очищення від H_2S . Абсорбція проводиться 15-процентним розчином моноетаноламіну. Очищений газ частково повертається в цикл, а частково відводиться з установки. Нестабільний гідрогеніза́т направляється в сепаратор низького тиску і стабілізаційну колону на подальшу переробку.

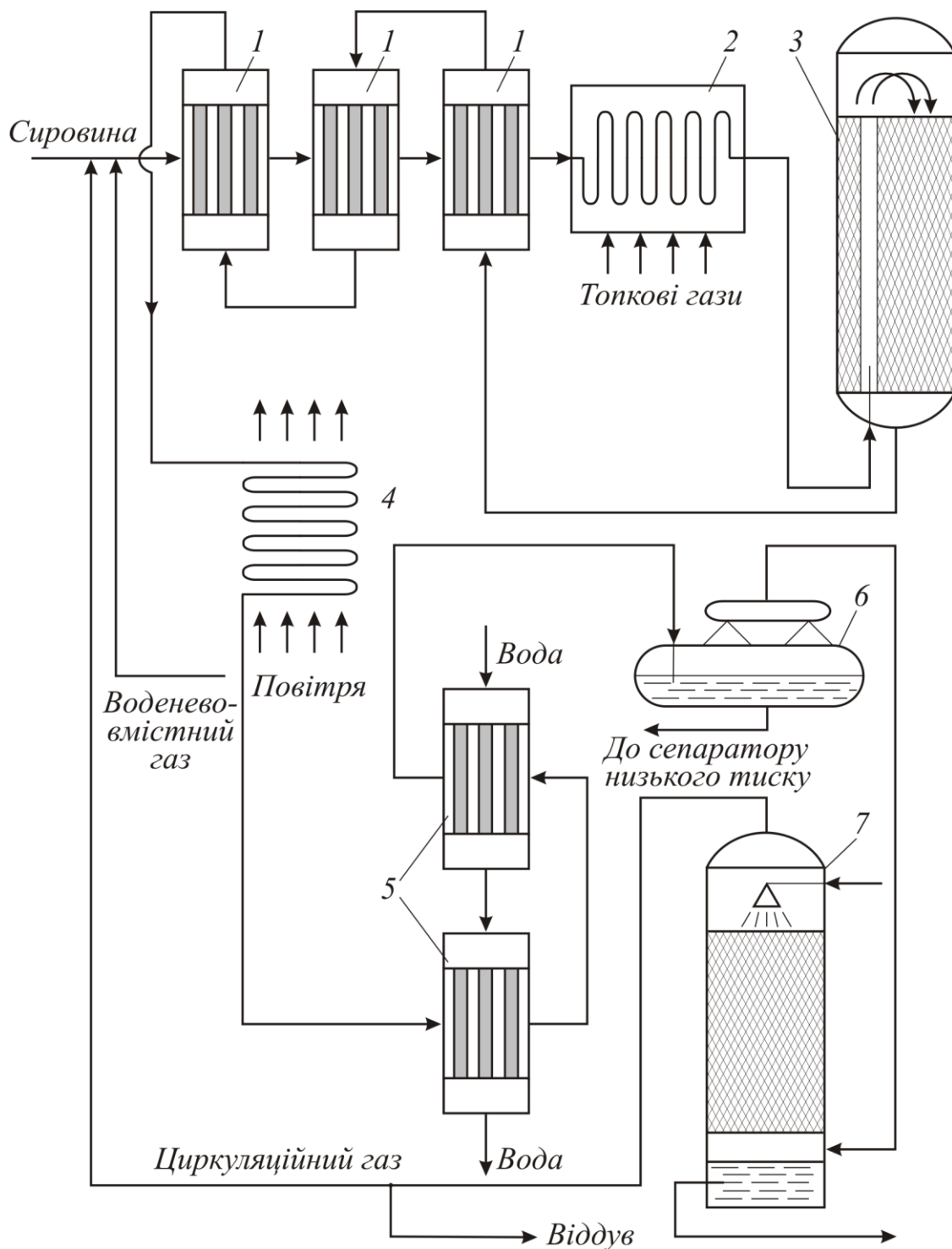


Рис. 3.12. Технологічна схема циркуляційного тракту процесу гідроочищення дизельних палив: 1 – теплообмінники; 2 – піч; 3 – реактор; 4 – повітряний холодильник; 5 – водяні холодильники; 6 – сепаратор; 7 – абсорбер

Інформаційна схема циркуляційного тракту гідроочищення дизельних палив приведена на *рис. 3.13*.

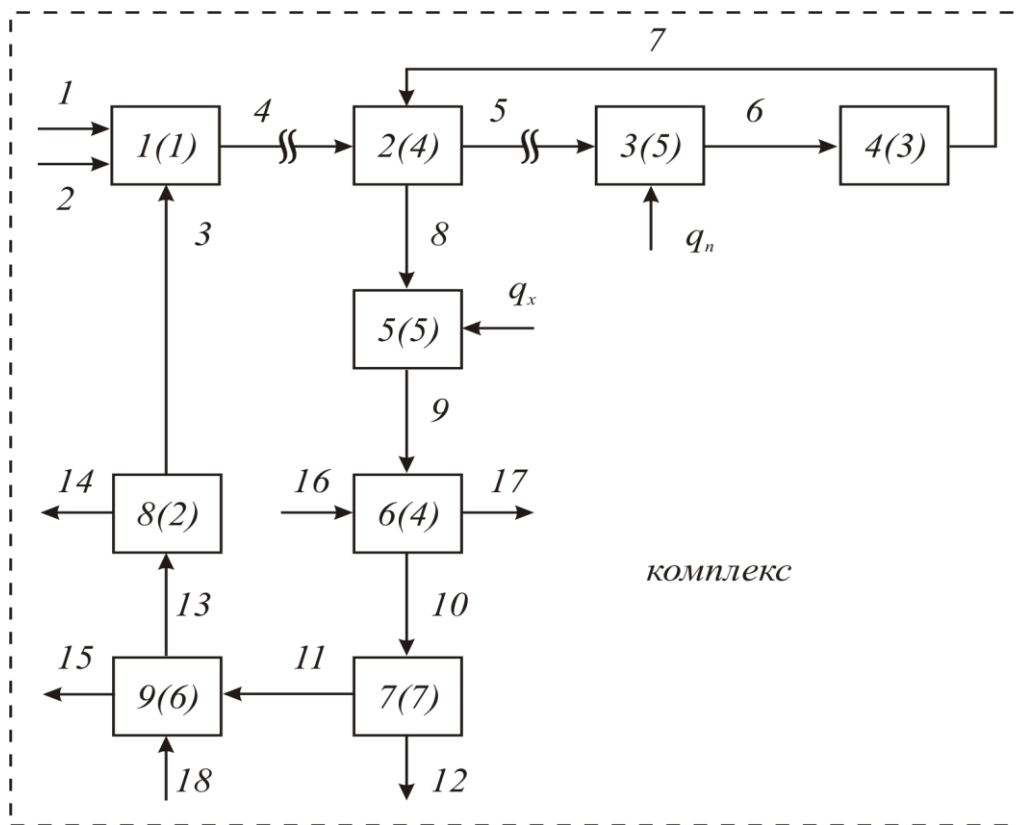


Рис. 3.13. Інформаційна схема циркуляційного тракту гідроочищення дизельних палив: **1** – змішувач потоків; **2** – теплообмінник; **3** – піч; **4** – реактор; **5** – повітряний холодильник; **6** – водяний холодильник; **7** – сепаратор; **8** – дільник потоків; **9** – абсорбер. У дужках позначені коди модулів

ХАРАКТЕРИСТИКИ МОДУЛІВ, ВИКОРИСТОВУВАНИХ ДЛЯ РОЗРАХУНКУ

З аналізу технологічної та інформаційної схем випливає, що при розрахунку циркуляційного тракту процесу гідроочищення необхідно використовувати модулі: змішувача і дільника потоків, реактора, абсорбера, сепаратора і теплообмінників.

Для розрахунку прийемо наступну структуру параметрів стану потоків:

- *перший параметр* – температура i -го потоку – $x(1, 1)$;
- *другий параметр* – сумарна витрата i -го потоку – $x(1, 2)$;
- *інші параметри* – витрати окремих компонентів.

Змішувач потоків

Лінійна математична модель змішувача має наступний вигляд:

$$G_{\text{вих}} = \sum_{i=1}^n G_{\text{вх}i}; \quad G_{\text{вих}j} = \sum_{i=1}^n G_{\text{вх}ij}; \quad j = 1, 2, \dots, n_k; \quad (3.68)$$

$$T_{\text{вих}} = \sum_{i=1}^n (A1 \cdot T_{\text{вх}_i} + A2_i \cdot G_{\text{вх}_i}) = 0,91 \cdot T_{\text{вх}_1} - 0,25 \cdot G_{\text{вх}_1} + 0,082 \cdot T_{\text{вх}_2} - 0,5 \cdot 10^{-5} \cdot G_{\text{вх}_2} + 0,006 \cdot T_{\text{вх}_3} + 0,55 \cdot 10^{-3} \cdot G_{\text{вх}_3}, \quad (3.69)$$

де $G_{\text{вих}}$, $G_{\text{вх}_i}$ – сумарні витрати вихідного і вхідного потоків; $G_{\text{вих}_j}$, $G_{\text{вх}_i,j}$ – витрати компонентів вихідного і вхідного потоків; $T_{\text{вих}}$, $T_{\text{вх}_i}$ – температури вихідного і вхідного потоків; n_k – число компонентів у потоці; n – число вхідних потоків; $A1$, $A2$ – коефіцієнти лінійного рівняння регресії, отриманого в результаті лінеаризації детермінованої моделі за допомогою методу повного факторного експерименту в досить вузькому інтервалі зміни параметрів.

Дільник потоків

Витрати k -го вихідного потоку виходять множенням витрат вхідного потоку на коефіцієнт розподілу. Коефіцієнт розподілу задається для кожного потоку і є k -м параметром апарата. Сума коефіцієнтів повинна дорівнювати 1.

Модуль повинен мати n параметрів, де n – число вихідних потоків. Нумерація вихідних потоків (їхній порядок) повинна відповідати нумерації параметрів апарата, тобто першому вихідному потоку відповідає перший параметр, другому – другий і так далі.

Температури вихідних потоків дорівнюють температурі вхідного потоку.

Реактор

Математична модель реактора має наступний вид:

$$\begin{aligned} G_{\text{вих}} &= G_{\text{вх}} \\ T_{\text{вих}} &= p \cdot T_{\text{вх}} \end{aligned}$$

$$G_{\text{вих}_j} = G_{\text{вх}_j} + r_j \cdot \alpha \cdot G_{\text{вх}_k,l}; \quad j=1, 2, \dots, n_k, \quad (3.70)$$

де r_j – видатковий коефіцієнт j -го компонента; $G_{\text{вх}_k,l}$, α – витрата і ступінь перетворення ключового компонента сірки; $p = 1,024$ – коефіцієнт статистичного рівняння, отриманий у результаті обробки результатів показників функціонування виробництв-аналогів.

Коефіцієнти r_j задаються в першому стовпці таблиці фізико-хімічних властивостей компонентів. Параметри апарата задаються в наступному порядку: номер ключового компонента k ; ступінь перетворення ключового компонента α ; коефіцієнт статистичного рівняння p .

Теплообмінник

При проходженні через теплообмінник склад потоків не міняється, тобто усі витрати у вихідних потоках відповідають (рівні) витратам у вхідних потоках. Температура кожного вихідного потоку обчислюється за регресійним рівнянням виду

$$T_{\text{вих}_J} = b_{0_J} + b_{11_J} \cdot T_{\text{вх}_1} + b_{12_J} \cdot G_{\text{вх}_1} + b_{21_J} \cdot T_{\text{вх}_2} + b_{22_J} \cdot G_{\text{вх}_2} + b_{3_J} \cdot k \cdot F \cdot n =$$

$$= [b_{11_J} \cdot b_{12_J}] \cdot \begin{bmatrix} T_{\text{вх}_1} \\ G_{\text{вх}_1} \end{bmatrix} + [b_{21_J} \cdot b_{22_J}] \cdot \begin{bmatrix} T_{\text{вх}_2} \\ G_{\text{вх}_2} \end{bmatrix} + [b_{0_J} + b_{3_J} \cdot k \cdot F \cdot n]; \dots J = 1, 2. \quad (3.71)$$

Для сировинного теплообмінника:

$$T_5 = 0,2T_4 - 0,3 \cdot 10^{-3} G_4 + 0,73T_7 + 0 \cdot G_7 + (-54,2 + 0,499 \cdot 10^{-3} k_1 F_1 n_1);$$

$$T_5 = 0,62T_4 + 0 \cdot G_4 + 0,21T_7 + 0,8 \cdot 10^{-3} G_7 - (49,15 - 0,539 \cdot 10^{-3} k_1 F_1 n_1).$$

Для водяного теплообмінника:

$$T_{10} = 0,65T_9 + 0,14 \cdot 10^{-3} G_9 + 0,35T_{16} - 0,25 \cdot 10^{-4} G_{16} + 0,147 \cdot 10^{-3} k_2 F_2 n_2;$$

$$T_{17} = 0,27T_9 + 0,125 \cdot 10^{-4} G_9 + 0,73T_{16} - 0,14 \cdot 10^{-4} G_{16} + 0,215 \cdot 10^{-3} k_2 F_2 n_2.$$

Індекси в змінних відповідають номерам потоків на інформаційній схемі (рис. 3.13).

Теплообмінний апарат із заданим тепловим навантаженням

Даний модуль призначено для розрахунку печі і повітряного теплообмінника. Математична лінійна модель має вид:

$$G_{\text{вих}} = G_{\text{вх}}; \quad G_{\text{вих}_i} = G_{\text{вх}_i};$$

$$T_{\text{вих}} = T_{\text{вх}} + b_1 \cdot G_{\text{вх}} + b_2 + b_3 \cdot q. \quad (3.72)$$

Тут b_1 , b_2 , b_3 – коефіцієнти лінійного рівняння регресії; q – теплове навантаження. Для печі:

$$b_1 = -0,11 \cdot 10^{-2}; \quad b_2 = 90,5; \quad b_3 = 1,04 \cdot 10^{-2};$$

для повітряного холодильника:

$$b_1 = 0,967 \cdot 10^{-3}; \quad b_2 = -79,35; \quad b_3 = -0,077.$$

Абсорбер

Математична модель абсорбера може бути представлена в наступному виді:

$$G_{\text{H}_2\text{S}, \text{вих}}^{\Gamma} = (1 - \beta) G_{\text{H}_2\text{S}, \text{вх}}^{\Gamma}; \quad G_{\text{H}_2\text{S}, \text{вих}}^{\text{P}} = \beta \cdot G_{\text{H}_2\text{S}, \text{вх}}^{\Gamma} + G_{\text{H}_2\text{S}, \text{вх}}^{\text{P}}$$

$$T_{\text{вих}}^{\Gamma} = T_{\text{вх}}^{\Gamma} - \Delta t_1; \quad T_{\text{вих}}^{\text{P}} = T_{\text{вх}}^{\text{P}} + \Delta t_2. \quad (3.73)$$

Тут β – ступінь абсорбції; Δt_1 , Δt_2 – зміни температур у газовому потоці та в абсорбенті; індекси Γ і P відносяться до газу і рідини.

В якості обчислювального блоку для абсорбера можна скористатися модулем роздільника.

Витрати k -ої речовини в m -му і n -му потоках розраховують за рівняннями:

$$\begin{aligned} G_{mk} &= \lambda_{ik} \cdot G_{ik} + \delta_{jk} \cdot G_{jk}; \\ G_{nk} &= (1 - \lambda_{ik}) \cdot G_{ik} + (1 - \delta_{jk}) \cdot G_{jk}. \end{aligned} \quad (3.74)$$

Тут:

$$0 \leq \lambda_{ik} \leq 1; \quad 0 \leq \delta_{jk} \leq 1; \quad k=1, 2, \dots, n_k;$$

n_k – кількість компонентів у потоці.

Коефіцієнти поділу, а також $\Delta t_1, \Delta t_2$ є параметрами модуля.

Послідовність параметрів повинна бути погоджена з порядком розташування параметрів стану потоків. Першим вхідним і вихідним потоком повинний бути потік газу, другим – потік рідини.

Сепаратор

Параметри стану вихідних потоків визначаються з рівнянь лінійної регресії. Газова фаза:

$$\begin{aligned} G_{\text{вих}} &= G_{\text{вих}_{\text{H}_2}} + G_{\text{вих}_{\text{Y}}} + G_{\text{вих}_{\text{H}_2\text{S}}} + G_{\text{вих}_{\text{C}_6}} - 0,7116 \cdot 10^{-2} G_{\text{вих}_{\text{T}}} + 27,361 \cdot T_{\text{BX}} - 2764,0 \\ G_{\text{вих}_{\text{H}_2}} &= G_{\text{вих}_{\text{H}_2}} - 0,1 \cdot 10^{-3} G_{\text{вих}_{\text{T}}} - 0,9 \cdot 10^{-2} \cdot T_{\text{BX}} - 4,0 \\ G_{\text{вих}_{\text{Y}}} &= G_{\text{вих}_{\text{Y}}} - 0,6 \cdot 10^{-2} G_{\text{вих}_{\text{T}}} + 10,6 \cdot 10^{-2} \cdot T_{\text{BX}} - 750,0 \\ G_{\text{вих}_{\text{H}_2\text{S}}} &= G_{\text{вих}_{\text{H}_2\text{S}}} - 0,9 \cdot 10^{-4} G_{\text{вих}_{\text{T}}} + 0,14 \cdot 10^{-2} \cdot T_{\text{BX}} - 11,0 \\ G_{\text{вих}_{\text{S}}} &= -0,16 \cdot 10^{-4} G_{\text{вих}_{\text{T}}} + 0,04 \cdot T_{\text{BX}} + 1,0 \\ G_{\text{вих}_{\text{C}_6}} &= G_{\text{вих}_{\text{C}_6}} - 0,86 \cdot 10^{-3} G_{\text{вих}_{\text{T}}} + 2,59 \cdot T_{\text{BX}} - 1450,0 \\ G_{\text{вих}_{\text{T}}} &= -0,5 \cdot 10^{-4} G_{\text{вих}_{\text{T}}} + 0,14 \cdot T_{\text{BX}} - 550,0. \end{aligned} \quad (3.75)$$

Рідка фаза:

$$\begin{aligned} G_{\text{вих}} &= G_{\text{вих}_{\text{S}}} + G_{\text{вих}_{\text{T}}} + 0,7116 \cdot 10^{-2} G_{\text{вих}_{\text{T}}} - 27,361 \cdot T_{\text{BX}} + 2764,0 \\ G_{\text{вих}_{\text{H}_2}} &= 0,1 \cdot 10^{-3} G_{\text{вих}_{\text{T}}} + 0,9 \cdot 10^{-2} \cdot T_{\text{BX}} + 4,0 \\ G_{\text{вих}_{\text{Y}}} &= 0,6 \cdot 10^{-2} G_{\text{вих}_{\text{T}}} - 10,6 \cdot 10^{-2} \cdot T_{\text{BX}} + 750,0 \\ G_{\text{вих}_{\text{H}_2\text{S}}} &= 0,9 \cdot 10^{-4} G_{\text{вих}_{\text{T}}} - 0,14 \cdot 10^{-2} \cdot T_{\text{BX}} + 11,0 \\ G_{\text{вих}_{\text{S}}} &= G_{\text{вих}_{\text{S}}} + 0,16 \cdot 10^{-4} G_{\text{вих}_{\text{T}}} - 0,04 \cdot T_{\text{BX}} - 1,0 \\ G_{\text{вих}_{\text{C}_6}} &= 0,86 \cdot 10^{-3} G_{\text{вих}_{\text{T}}} - 2,59 \cdot T_{\text{BX}} + 1450,0 \\ G_{\text{вих}_{\text{T}}} &= 1,00005 \cdot G_{\text{вих}_{\text{T}}} - 14 \cdot T_{\text{BX}} + 550,0. \end{aligned} \quad (3.76)$$

Тут індекси Y, б і T відносяться до вуглеводнів (парафіни C₁–C₅), бензину і палива.

ПОРЯДОК ВВЕДЕННЯ ПОЧАТКОВОЇ ІНФОРМАЦІЇ

Приведена на *рис. 3.12* ХТС містить один комплекс, в який входять всі апарати. Для перетворення замкнутої ХТС в розімкнену необхідно розірвати два потоки: 4 і 5. В цьому випадку послідовність розрахунку буде наступною:

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

Компонентам потоків надані наступні номери:

Номер	1	2	3	4	5	6	7	8
Речовина	H ₂	C ₁ –C ₅	H ₂ S	S	бензин	паливо	H ₂ O	розчин МЕА

Початкові дані для розрахунку вводяться в ЕОМ в наступному порядку:

I. ПРОСТІ ЗМІННІ

- 1) Число елементів у складі ХТС;
- 2) Число потоків, що поступають в ХТС із зовнішнього середовища;
- 3) Число комплексів в ХТС;
- 4) Число потоків в ХТС;
- 5) Максимальне число параметрів одного потоку;
- 6) Максимальне число властивостей однієї речовини;
- 7) Число речовин, що беруть участь в процесі;
- 8) Максимальне число потоків, що входять в один апарат або виходять з апарату;
- 9) Максимальне число потоків, розірваних в одному комплексі;
- 10) Максимальне число параметрів у одного апарата. У нашому прикладі ця інформація виглядатиме так:

9 4 1 18 10 1 8 3 2 18.

II. МАСИВИ

- 1) Фізико-хімічні властивості речовин.

Для кожної речовини вводять її номер, число властивостей, необхідних для розрахунку:

1	1	-2,9
2	1	8,24
3	1	1
4	1	-1
5	1	22,2
6	1	-27,94
7	1	0
8	1	0

- 2) Список послідовності розрахунку системи, знайдений в результаті аналізу її структури:

3 4 2 5 6 7 9 8 1.

- 3) Коди модулів в послідовності розрахунку:

5 3 4 5 4 7 6 2 1.

4) Комплекси в послідовності розрахунку.

Якщо апарат не входить в комплекс, значення відповідного елемента в цьому масиві дорівнює -1 , якщо апарат входить в комплекс, але в комплексі розраховується не останнім, то значення елемента дорівнює 0 , якщо останнім, то воно дорівнює 1 :

0 0 0 0 0 0 0 0 1.

5) Розірвані потоки в кожному комплексі.

Для кожного комплексу необхідно вказати число розірваних потоків і їх номери:

2 4 5.

6) Потоки, що входять в апарати:

- номер апарата;
- число вхідних в апарат потоків;
- номери цих потоків.

1	3	1	2	3
2	2	4	7	
3	1	5		
4	1	6		
5	1	8		
6	2	9	16	
7	1	10		
8	1	13		
9	2	11	18	

7) Потоки, що виходять з апаратів:

- номер апарата;
- число потоків, що виходять;
- номери цих потоків.

1	1	4		
1	2	5		
2	1	6		
4	1	7		
5	1	9		
6	2	10	17	
7	2	11	12	
8	2	3	14	
9	2	13	15	

8) Параметри апаратів приводяться в наступному порядку:

- номер апарата;
- число параметрів;
- значення параметрів в послідовності, що визначаються відповідним модулем.

1	6	0,91	$-0,25 \cdot 10^{-5}$	0,082	$-0,5 \cdot 10^{-5}$
	0,006	$-0,55 \cdot 10^{-3}$			

2	15	218,6	221	3	-54,2
	0,2	$-0,3 \cdot 10^{-3}$	0,73	0	$0,499 \cdot 10^{-3}$
	49,15	0,062	0	0,21	$0,8 \cdot 10^{-3}$
	$-0,539 \cdot 10^{-3}$				
3	4	$-0,11 \cdot 10^{-2}$	90,5	$1,04 \cdot 10^{-2}$	8722,5
4	2	4	0,813		
5	4	$0,967 \cdot 10^{-3}$	-79,35	-0,017	4652
6	15	216	200	2	0
	0,65	$0,14 \cdot 10^{-3}$	0,35	$-0,25 \cdot 10^{-4}$	$-0,147 \cdot 10^{-3}$
	0	0,27	$0,125 \cdot 10^{-4}$	0,73	$-0,14 \cdot 10^{-4}$
	$0,215 \cdot 10^{-3}$				
7	0				
8	18	-5	5	1	1
	0,006	1	1	1	1
	0	0	0	0	0
	0	0	0	0	0

9) Параметри вхідних потоків ХТС: параметри потоку в послідовності, що визначається структурою відповідного вектора потоку. Якщо число параметрів даного потоку менше за максимальне, то параметри, що залишилися, вважаються нульовими.

1	55	75000	0	0	0	75	0	74925	0	0
2	50	520	275,6	243,9	0,5	0	0	0	0	0
16	25	65000	0	0	0	0	0	0	65000	0
18	40	10000	0	0	15,0	0	0	0	0	9985,0

В результаті рахунку на друк видається:

1. Початкова інформація.

2. Розрахункові параметри всіх потоків в наступному вигляді:

а) нуль – ознака закінчення розрахунку даного потоку;

б) номер потоку;

в) параметри потоків.

У разі помилки в початкових даних перед таблицею параметрів потоків друкується текст:

потік → номер потоку → невідоме при розрахунку апарата → номер апарата, і далі – проміжна таблиця параметрів потоків.

При цьому в першому стовпці нулі стоять тільки для тих потоків, розрахунок яких закінчений. Для тих потоків, параметри яких визначаються

при розрахунку даного комплексу, в нульовому стовпці стоятимуть позитивні числа, а для потоків, що не розраховуються в даному комплексі – (-1). В цьому випадку необхідно перевірити всю початкову інформацію і внести необхідні зміни.

ПОЧАТКОВІ ДАНІ ДЛЯ РОЗРАХУНКУ

Початкові дані для розрахунку параметрів стану технологічних потоків ХТС приведені нижче.

Витрата сировини на вході в систему $G^{(1)}$	71000–75000 кг/год.
зокрема:	
дизельне паливо ($t_{\text{кип.}} = 140\text{--}290\text{ }^{\circ}\text{C}$)	71936–74925 кг/год.
сірчисті з'єднання (у перерахунку на сірку), $G_S^{(1)}$	64–75 кг/год.
Температура потоку, $T^{(1)}$	51–60 $^{\circ}\text{C}$
Витрата газу, що містить водень $G^{(2)}$	345–780 кг/год.
зокрема:	
водень $G_{\text{H}_2}^{(2)}$	$(0,35\text{--}0,80) \cdot G^{(2)}$ кг/год.
вуглеводні (парафіни) ($\text{C}_1\text{--}\text{C}_5$) $G_Y^{(2)}$	$(0,65\text{--}0,20) \cdot G^{(2)}$ кг/год.
сірководень $G_{\text{H}_2\text{S}}^{(2)}$	$(0\text{--}0,002) \cdot G^{(2)}$ кг/год.
Витрата абсорбенту $G^{(18)}$	6500–15000 кг/год.
зокрема:	
сірководень $G_{\text{H}_2\text{S}}^{(18)}$	$(0\text{--}0,0025) \cdot G^{(18)}$ кг/год.
розчин моноетаноламіна $G_{\text{MEA}}^{(18)}$	$(1\text{--}0,9975) \cdot G^{(18)}$ кг/год.
Витрата води на охолодження суміші у водяних холодильниках $G_{\text{H}_2\text{O}}$	60000 (при 15 $^{\circ}\text{C}$)– 65000 (при 25 $^{\circ}\text{C}$) кг/год.
Початкова температура води $T_{\text{H}_2\text{O}}$	15–25 $^{\circ}\text{C}$
Тиск в циркуляційному контурі	50 атм.

ПАРАМЕТРИ УСТАТКУВАННЯ:

1. Сировинний теплообмінник	
поверхня теплообміну F_1	221 м ²
коефіцієнт теплопередачі k_{T_1}	218,6 Вт/(м ² ·К)
число теплообмінників n_1	3 шт.
2. Піч	
теплове навантаження $q_{\text{п}}$	8722,5 кВт
3. Реактор	
ступінь перетворення (з розрахунку на сірку) α	81,3 %
витрата реагентів на 1 кг перетвореної сірки	
водень r_{H_2}	2,9 кг/кг
дизельне паливо r_T	27,54 кг/кг

вихід продуктів на 1 кг перетвореної сірки	
сірководень r_{H_2S}	1 кг/кг
вуглеводні (парафіни) r_Y	8,24 кг/кг
бензин r_6	22,2 кг/кг
4. Повітряний теплообмінник	
теплове навантаження q_x	4652 кВт
5. Водяний холодильник	
поверхня теплообміну F_2	200 м ²
коефіцієнт теплопередачі k_{T_2}	216 Вт/(м ² ·К)
число апаратів n_2 ,	2 шт.
6. Сепаратор	
тиск	5,106 Па
7. Абсорбер	
ступінь абсорбції β	99,4 %
різниця температур на вході і на виході абсорбера, Δt	5 °С
8. Дільник потоків	
коефіцієнт розподілу потоків, γ	0,96

Блок-схема і лістинг програми «GIDRA» приведений у додатках 4, 5.

ОПИС ПРОГРАМИ «GIDRA» ДЛЯ РОЗРАХУНКУ ЦИРКУЛЯЦІЙНОГО ТРАКТУ ПРОЦЕСУ ГІДРООЧИЩЕННЯ ДИЗЕЛЬНИХ ПАЛИВ

Для виконання розрахунку необхідно виконати наступні дії:

- 1) Запустіть програму «GIDRA.EXE». Виконуйте всі інструкції, що з'являються на екрані. Інтервали припустимих значень величин, що вводяться, наведені у попередньому розділі.
- 2) По закінченні розрахунку програма завершить свою роботу і поверне вас у VOLKOV COMMANDER. Файл GIDRA.REZ з результатами розрахунку запишеться в той же каталог, що і GIDRA.EXE. Для перегляду результатів розрахунку відкрийте файл GIDRA.REZ натисканням клавіші F3 (F4) або сполученням клавіш ALT+F3 (F4).
- 3) В результаті розрахунку контрольні температури потоків повинні бути в межах інтервалів припустимих значень:

<i>№ потоку</i>	<i>припустимі значення</i>
5	285 – 310°C
6	360 – 420°C
9	60 – 80°C
10	40 – 55°C

НАВЧАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

При варіюванні сировинних потоків в межах 20–40% від базового значення і температур входів в межах 5–15% від базового значення проаналізувати вплив вказаних параметрів на показники функціонування схеми гідроочищення дизельних палив. У якості показників функціонування можуть бути використані параметри вихідних потоків (12, 14, 15 за схемою *рис. 3.13*) і параметри внутрішніх потоків.

НАВЧАЛЬНИЙ ПРИКЛАД

Використовуючи моделюючу програму «GIDRA» розрахувати циркуляційний тракт процесу гідроочищення дизельних палив і виявити параметричну чутливість за каналами «параметри продуктового потоку (12) – витрата та склад газу, що містить водень (BCГ)» і «параметри потоку здувки (14) – витрата та склад газу, що містить водень (BCГ)» при наступних початкових даних:

Витрата сировини на вході в систему $G^{(1)}$	73000 кг/год.
зокрема:	
дизельне паливо ($t_{\text{кип.}} = 140\text{--}290\text{ }^{\circ}\text{C}$)	72925 кг/год.
сірчисті з'єднання (у перерахунку на сірку), $G_S^{(1)}$	75 кг/год.
Температура потоку, $T^{(1)}$	55 $^{\circ}\text{C}$
Витрата газу, що містить водень $G^{(2)}$	500 кг/год.
зокрема:	
водень $G_{\text{H}_2}^{(2)}$	300 кг/год.
вуглеводні (парафіни) ($\text{C}_1\text{--}\text{C}_5$) $G_Y^{(2)}$	199,5 кг/год.
сірководень $G_{\text{H}_2\text{S}}^{(2)}$	0,05 кг/год.
Витрата абсорбенту $G^{(18)}$	9000 кг/год.
зокрема:	
сірководень $G_{\text{H}_2\text{S}}^{(18)}$	20 кг/год.
розчин моноетаноламіна $G_{\text{МЕА}}^{(18)}$	8980 кг/год.
Витрата води на охолодження суміші у водяних холодильниках $G_{\text{H}_2\text{O}}$	65000 кг/год.
Початкова температура води $T_{\text{H}_2\text{O}}$	25 $^{\circ}\text{C}$
ПАРАМЕТРИ УСТАТКУВАННЯ:	
1. Сировинний теплообмінник	
поверхня теплообміну F_1	221 м ²
коефіцієнт теплопередачі k_T	218,6 Вт/(м ² ·К)
число теплообмінників n_1	3 шт.
2. Піч	
теплове навантаження $q_{\text{п}}$	8722,5 кВт

3. Реактор

ступінь перетворення (з розрахунку на сірку) α	81,3 %
витрата реагентів на 1 кг перетвореної сірки	
водень r_{H_2}	2,9 кг/кг
дизельне паливо r_T	27,54 кг/кг
вихід продуктів на 1 кг перетвореної сірки	
сірководень r_{H_2S}	1 кг/кг
вуглеводні (парафіни) r_Y	8,24 кг/кг
бензин r_6	22,2 кг/кг

4. Повітряний теплообмінник

теплове навантаження q_x 4652 кВт

5. Водяний холодильник

поверхня теплообміну F_2 200 м²
коефіцієнт теплопередачі k_{T_2} 216 Вт/(м²·К)

число апаратів n_2 , 2 шт.

6. Сепаратор

тиск 5,106 Па

7. Абсорбер

ступінь абсорбції β 99,4 %

різниця температур на вході і на виході абсорбера, Δt 5 °С

8. Дільник потоків

коефіцієнт розподілу потоків, γ 0,96

Для визначення параметричної чутливості за заданими каналами змінювались такі вхідні параметри:

– витрата газу, що містить водень (ВСГ) $500 \frac{+200}{-100}$ кг/год;

– вміст водню в ВСГ $300 \frac{+50}{-100}$ кг/год

Результати розрахунків циркуляційного тракту процесу гідроочищення для базового варіанта та при зміні деяких параметрів наведені в **табл. 3.12 – 3.14**. В **табл. 3.15 – 3.18** – визначені дані з параметричної чутливості.

Для порівняння ступеня впливу вхідних параметрів використовувалась нормована параметрична чутливість

$$P_{\text{відн}} = \frac{\Delta_{\text{вих}}}{\Delta_{\text{вх}}} \cdot \frac{Y}{X},$$

де Y , X – вихідний та вхідний параметри відповідно;

$\frac{\Delta_{\text{вих}}}{\Delta_{\text{вх}}} = \frac{(\Delta(+)/\Delta_{\text{вх}}) + (\Delta(-)/\Delta_{\text{вх}})}{2}$ – усереднені значення параметричної чутливості.

Таблиця 3.12

Результати розрахунків по базовому варіанту

№ по- току	Витрата, кг/год									Температура поток, °С
	H ₂	C ₁ -C ₅	H ₂ S	S	Бензин	ДТ	H ₂ O	МЕА	Σ	
1	0,0	0,0	0,0	75,0	0,0	72925,0	0,0	0,0	73000	55,0
2	300,0	199,5	0,50	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	500,0	50,0
3	2551,3	1937,5	0,31	1,83	198,3	177,7	0,0	0,0	4866,9	46,1
4	2851,3	2137,0	0,81	76,8	198,3	73102,7	0,0	0,0	78366,9	54,5
5	2851,3	2137,0	0,81	76,8	198,3	73102,7	0,0	0,0	78366,9	303,2
6	2851,3	2137,0	0,81	76,8	198,3	73102,7	0,0	0,0	78366,9	398,1
7	2669,1	2654,8	63,3	14,4	1585,6	71381,1	0,0	0,0	78368,2	407,6
8	2669,1	2654,8	63,3	14,4	1585,6	71381,1	0,0	0,0	78368,2	152,5
9	2669,1	2654,8	63,3	14,4	1585,6	71381,1	0,0	0,0	78368,2	69,9
10	2669,1	2654,8	63,3	14,4	1585,6	71381,1	0,0	0,0	78368,2	51,1
11	2657,6	2018,2	53,1	1,90	206,6	185,1	0,0	0,0	5122,4	51,1
12	11,50	636,6	10,20	12,5	1379,0	71196,0	0,0	0,0	73245,7	51,1
13	2657,6	2018,2	0,32	1,90	206,6	185,1	0,0	0,0	5069,7	46,1
14	106,3	80,7	0,01	0,08	8,26	7,40	0,0	0,0	202,8	46,1
15	0,0	0,0	72,7	0,0	0,0	0,0	0,0	8980,0	9052,7	45,0
16	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	65000	0,0	65000,0	25,0
17	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	65000	0,0	65000,0	48,6
18	0,0	0,0	20,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8980,0	9000,0	40,0

Таблиця 3.13

Результати розрахунків при зміні витрати ВСГ
($G^{(2)}$ зменшується від 500 до 400 кг/год)

№ по- току	Витрата, кг/год									Температура поток, °С
	H_2	$C_1 - C_5$	H_2S	S	Бензин	ДТ	H_2O	МЕА	Σ	
1	0,0	0,0	0,0	75,0	0,0	72925,0	0,0	0,0	73000	55,0
2	240,0	159,5	0,50	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	400,0	50,0
3	1155,7	629,6	0,30	1,78	105,9	177,9	0,0	0,0	2071,2	44,9
4	1395,7	789,1	0,80	76,8	105,9	73102,7	0,0	0,0	75471,2	54,3
5	1395,7	789,1	0,80	76,8	105,9	73102,7	0,0	0,0	75471,2	315,9
6	1395,7	789,1	0,80	76,8	105,9	73102,7	0,0	0,0	75471,2	414,0
7	1215,4	1305,3	63,2	14,4	1492,4	71382,3	0,0	0,0	75472,9	423,9
8	1215,4	1305,3	63,2	14,4	1492,4	71382,3	0,0	0,0	75472,9	153,5
9	1215,4	1305,3	63,2	14,4	1492,4	71382,3	0,0	0,0	75472,9	68,1
10	1215,4	1305,3	63,2	14,4	1492,4	71382,3	0,0	0,0	75472,9	49,9
11	1203,9	655,9	52,9	1,85	110,3	185,3	0,0	0,0	2210,0	49,9
12	11,50	649,4	10,40	12,5	1382,1	71197,0	0,0	0,0	73262,9	49,9
13	1203,9	655,9	0,32	1,85	110,3	185,3	0,0	0,0	2157,5	44,9
14	48,2	26,2	0,01	0,07	4,41	7,41	0,0	0,0	86,3	44,9
15	0,0	0,0	72,5	0,0	0,0	0,0	0,0	8980,0	9052,5	45,0
16	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	65000	0,0	65000,0	25,0
17	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	65000	0,0	65000,0	48,0
18	0,0	0,0	20,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8980,0	9000,0	40,0

Таблиця 3.14

Результати розрахунків при зміні складу ВСГ
($G_{H_2}^{(2)}$ зменшується від 300 до 200 кг/год)

№ по-току	Витрата, кг/год									Температура потоку, °C
	H_2	C_1-C_5	H_2S	S	Бензин	ДТ	H_2O	МЕА	Σ	
1	0,0	0,0	0,0	75,0	0,0	72925,0	0,0	0,0	73000	55,0
2	200,0	299,5	0,50	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	500,0	50,0
3	191,0	4268,4	0,31	1,82	196,2	177,7	0,0	0,0	4835,4	46,1
4	391,0	4567,9	0,81	76,8	196,2	73102,7	0,0	0,0	78335,4	54,5
5	391,0	4567,9	0,81	76,8	196,2	73102,7	0,0	0,0	78335,4	303,4
6	391,0	4567,9	0,81	76,8	196,2	73102,7	0,0	0,0	78335,4	398,3
7	210,5	5082,9	63,3	14,4	1583,3	71381,1	0,0	0,0	78335,5	407,9
8	210,5	5082,9	63,3	14,4	1583,3	71381,1	0,0	0,0	78335,5	152,5
9	210,5	5082,9	63,3	14,4	1583,3	71381,1	0,0	0,0	78335,5	69,8
10	210,5	5082,9	63,3	14,4	1583,3	71381,1	0,0	0,0	78335,5	51,1
11	199,0	4446,3	53,1	1,90	204,3	185,1	0,0	0,0	5089,6	51,1
12	11,50	636,7	10,20	12,5	1379,0	71196,0	0,0	0,0	73245,9	51,1
13	199,0	4446,3	0,32	1,90	204,3	185,1	0,0	0,0	5036,9	46,1
14	7,96	177,9	0,01	0,08	8,17	7,40	0,0	0,0	201,5	46,1
15	0,0	0,0	72,7	0,0	0,0	0,0	0,0	8980,0	9052,7	45,0
16	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	65000	0,0	65000,0	25,0
17	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	0,0	65000	0,0	65000,0	48,5
18	0,0	0,0	20,0	0,0	0,0	0,0	0,0	8980,0	9000,0	40,0

Таблиця 3.15

Параметрична чутливість за каналами «параметри продуктового потоку (I2) – витрата газу, що містить водень (BCГ)» при базовому рівні $G^{(2)}=500$ кг/год

№ потоку	Витрата, кг/год									Температура потоку °С
	H_2	C_1-C_5	H_2S	S	Бензин	ДТ	H_2O	МЕА	Σ	
I2(баз)	11,50	636,56	10,20	12,47	1378,95	71196,04	0,0	0,0	73245,71	51,08
<i>Позитивне відхилення по $G^{(2)}$ $\Delta vх(+)$ = + 200 кг/год</i>										
I2(+)	11,51	611,98	9,88	12,39	1372,96	71194,07	0,0	0,0	73212,79	53,39
$\Delta(+)$	+0,01	-24,58	-0,32	-0,08	-5,99	-1,97	0	0	-32,92	2,31
$\Delta(+)/\Delta_{ex}$	$5,10^{-5}$	-0,1229	-0,0016	$-4,10^{-4}$	-0,02995	-0,00985	0	0	-0,1646	0,0116
<i>Негативне відхилення по $G^{(2)}$ $\Delta vх(-)$ = - 100 кг/год</i>										
I2(-)	11,49	649,38	10,37	12,50	1382,07	71197,08	0	0	73262,89	49,87
$\Delta(-)$	-0,01	12,82	0,17	0,03	3,12	1,04	0	0	17,18	-1,21
$\Delta(-)/\Delta_{ex}$	$1,10^{-4}$	-0,1282	-0,0017	$-3,10^{-4}$	-0,0312	-0,0104	0	0	-0,1718	0,0121
<i>Усереднені значення</i>										
$\Delta_{вих}/\Delta_{ex}$	$0,75,10^{-4}$	-0,1256	-0,0017	$-3,5,10^{-4}$	-0,0306	-0,0101	0	0	-0,1682	0,0118
$P_{відн}$	0,00326	-0,0986	0,0809	0,0140	0,0111	0,000071	0	0	0,001148	0,1157

Таблиця 3.16

Параметрична чутливість за каналами «параметри потоку здувки (14) – витрата газу, що містить водень (ВСТ)»
при базовому рівні $G^{(2)}=500$ кг/год

№ потоку	Витрата, кг/год									Температура потоку °С
	H_2	C_1-C_5	H_2S	S	Бензин	ДТ	H_2O	МЕА	Σ	
14(баз)	106,3	80,73	0,01	0,08	8,26	7,40	0,0	0,0	202,79	46,08
<i>Позитивне відхилення по $G^{(2)}$ $\Delta v_x(+)$ = + 200 кг/год</i>										
14(+)	222,01	178,99	0,01	0,08	14,93	7,39	0,0	0,0	423,42	48,39
$\Delta(+)$	115,71	98,26	0	0	6,67	-0,01	0	0	220,63	2,31
$\Delta(+)/\Delta_{ex}$	0,5785	0,4913	0	0	0,0333	$-5,10^{-4}$	0	0	1,1031	0,0116
<i>Негативне відхилення по $G^{(2)}$ $\Delta v_x(-)$ = - 100 кг/год</i>										
14(-)	48,15	26,23	0,01	0,07	4,41	7,41	0	0	86,30	44,87
$\Delta(-)$	-58,15	-54,5	0	-0,01	-3,85	0,01	0	0	-116,49	-1,21
$\Delta(-)/\Delta_{ex}$	0,5815	0,545	0	0	0,0385	$-1,10^{-4}$	0	0	1,1649	0,0121
<i>Усереднені значення</i>										
$\Delta_{вих}/\Delta_{ex}$	0,580	0,5181	0	0	0,0359	$-3,10^{-4}$	0	0	1,1340	0,0118
$P_{відн}$	<u>2,728</u>	<u>3,209</u>	0	0	<u>2,173</u>	0,0270	0	0	2,796	0,1280

Таблиця 3.17

Параметрична чутливість за каналами «параметри продуктового потоку (I2) – вміст водню в ВСГ» при базовому рівні $G_{H_2}^{(2)} = 300$ кг/год

№ потоку	Витрата, кг/год									Температура потоку °С
	H_2	$C_1 - C_5$	H_2S	S	Бензин	ДТ	H_2O	МЕА	Σ	
I2(баз)	11,50	636,56	10,20	12,47	1378,95	71196,04	0,0	0,0	73245,71	51,08
<i>Позитивне відхилення по $G_{H_2}^{(2)}$ $\Delta v_x(+)$ = + 50 кг/год</i>										
I2(+)	11,50	636,56	10,20	12,47	1378,97	71196,05	0,0	0,0	73245,83	51,07
$\Delta(+)$	0	0,09	0	0	0,02	0,01	0	0	0,12	-0,01
$\Delta(+)/\Delta_{вх}$	0	0,0018	0	0	0,0004	0,0002	0	0	0,0024	-0,0002
<i>Негативне відхилення по $G_{H_2}^{(2)}$ $\Delta v_x(-)$ = - 100 кг/год</i>										
I2(-)	11,50	636,56	10,20	12,47	1378,97	71196,05	0,0	0,0	73245,88	51,07
$\Delta(-)$	0	0,01	0	0	0,02	0,01	0	0	0,17	-0,01
$\Delta(-)/\Delta_{вх}$	0	0,0001	0	0	0,0002	0,0001	0	0	0,0017	-0,0001
<i>Усереднені значення</i>										
$\Delta_{вих} / \Delta_{вх}$	0	0,001	0	0	0,0003	0,00015	0	0	-0,1682	0,0118
$P_{відн}$	0	0,0248	0	0	$6,5 \cdot 10^{-4}$	$6,10^{-7}$	0	0	$8,3 \cdot 10^{-6}$	$8,8 \cdot 10^{-4}$

Таблиця 3.18

Параметрична чутливість за каналами «параметри потоку здувки (14) – вміст водню в ВСГ» при базовому рівні 300 кг/год

№ потоку	Витрата, кг/год									Температура потоку °С
	H ₂	C ₁ –C ₅	H ₂ S	S	Бензин	ДТ	H ₂ O	МЕА	Σ	
14(баз)	106,3	80,73	0,01	0,08	8,26	7,40	0,0	0,0	202,79	46,08
<i>Позитивне відхилення по G_{H₂}⁽²⁾ Δvх(+)= + 50 кг/год</i>										
14(+)	156,72	29,37	0,01	0,08	8,20	7,40	0,0	0,0	201,77	46,07
Δ(+)	50,42	-51,36	0	0	-0,06	0	0	0	-1,02	-0,01
Δ(+)/Δ _{вх}	1,008	-1,027	0	0	0,0012	0	0	0	-0,0204	-0,0002
<i>Негативне відхилення по G_{H₂}⁽²⁾ Δvх(-)= - 100 кг/год</i>										
14(-)	7,96	177,85	0,01	0,07	8,17	7,40	0	0	201,48	46,07
Δ(-)	-43,50	97,12	0	0	-0,09	0	0	0	-1,31	-0,01
Δ(-)/Δ _{вх}	0,435	-0,971	0	0	0,0009	0	0	0	0,0131	0,0001
<i>Усереднені значення</i>										
Δ _{вих} /Δ _{вх}	0,7215	0,9991	0	0	0,00105	0	0	0	0,01675	0,0002
P _{відн}	<u>2,036</u>	<u>3,713</u>	0	0	0,0381	0	0	0	0,0248	9,8·10 ⁻⁴

Як видно з порівнювання *табл. 3.12 – 3.14* при зміні вхідних параметрів змінюється значна кількість параметрів внутрішніх потоків (від 73 до 103) і 10–17 параметрів вихідних потоків схеми. Це дає можливість визначати параметричну чутливість за багатьма каналами.

З аналізу параметричної чутливості за заданими каналами видно, що на параметри продуктового потоку (12) зміна розглянутих вхідних параметрів практично не впливає (*табл. 3.15 і 3.17*). Найбільші значення нормованої параметричної чутливості не перевищують 0,12.

На ряд параметрів потоку здувки (14) ті ж вхідні параметри впливають більш істотно. Так, наприклад, по каналу «сумарний потік здувки – витрата ВСТ» нормована параметрична чутливість складає 2,796 (*табл. 3.16*), а по каналу «кількість вуглеводнів у здувці – склад ВСТ» – 3,713 (*табл. 3.18*).

При обробці розрахункових даних для визначення параметричної чутливості (*табл. 3.15–3.18*) доцільно використовувати *Microsoft Excel*.

4. ОСНОВНІ ПРИНЦИПИ СТВОРЕННЯ І РОБОТИ МОДЕЛЮЮЧИХ ПРОГРАМ ДЛЯ РОЗРАХУНКУ ХТС

Методи та алгоритми розрахунку параметрів стану технологічних потоків ХТС надзвичайно трудомісткі. Тому актуальною задачею є створення програм для моделювання складних технологічних систем, що мали б достатню гнучкість, універсальність і могли б при мінімальній доробці застосовуватися для дослідження ХТС довільної структури. Такі програми називають моделюючими (МП), тому що вони призначені для моделювання роботи складних схем. В даний час у світі розроблено близько 20 МП, що дозволяють у короткий термін проаналізувати різні варіанти схем технологічного процесу. Найбільш відомі програми: «СИНТАМ», «РОСС», «АСТР», «CHEVRON», «FLOWTRAN».

Програми для моделювання ХТС, що реалізують декомпозиційні розрахунки, складаються з двох частин: аналізу структури і розрахунку ХТС.

Підпрограми аналізу структури призначені для виділення комплексів на графі, що відповідає даній технологічній схемі, визначення оптимальних місць розриву зв'язків у ХТС із метою одержання системи рівнянь мінімальної розмірності, трансформації замкненої схеми в розімкнуту й одержання списку оптимальної послідовності розрахунку елементів системи.

Підпрограми розрахунку ХТС, призначені для організації обчислень параметрів роботи складних схем, відрізняються великою різноманітністю. Кожному елементу ХТС відповідає, як правило, своя підпрограма («модуль»), призначена для розрахунку параметрів вихідних потоків за відомим значенням вхідних і керуючих перемінних.

Математичну модель кожного елемента одержують у виді сукупності математичних моделей типових технологічних операторів, що являє собою або матрицю перетворення, або нелінійне рівняння, або системи алгебраїчних чи диференціальних рівнянь.

Один елемент ХТС може бути описаний також як і сукупність декількох модулів. Так, наприклад, багатошаровий адіабатичний реактор із проміжним охолодженням між шарами може бути представлений сукупністю наступних модулів:

- хімічного перетворення (шари каталізатора);
- охолодження (проміжні теплообмінники);
- змішання і поділу.

Деякі елементи ХТС можуть не розглядатися при моделюванні – наприклад, буферні ємності, що не змінюють параметрів технологічних потоків.

4.1. ВИМОГИ, ПРОПОНОВАНІ ДО МОДУЛІВ

Структура і ступінь деталізації математичного опису залежить від цілей дослідження, обсягу інформації, покладеного в основу моделі, і інших факторів.

За причини складності технологічних процесів при розробці їхніх математичних моделей звичайно вводять ряд допущень. Наприклад, для опису структури потоку в апараті часто використовують два граничних режими: режим ідеального змішання чи повного витиснення. Як допущення також приймають сталість температури чи тиску в означеній зоні апарата, сталість швидкості реакції та ін. Коли процес досить складний, його розглядають як «чорний ящик». У цих випадках на підставі експериментальних даних за допомогою статистичних методів будують регресійну модель процесу.

*Математичний опис елемента ХТС, оформлений у виді обчислювального блоку моделюючої програми, називається **модулем**.* Сукупність модулів, що входять до складу програми, утворюють бібліотеку чи банк модулів.

Розробка програмного модуля включає наступні основні етапи:

- вибір типу математичної моделі елемента ХТС;
- побудова математичного опису з обліком усіх зроблених допущень, рівняння при цьому повинні утворити замкнуту систему, число вихідних змінних повинно дорівнювати числу незалежних рівнянь;
- ідентифікація параметрів математичного опису;
- вибір методу рішення системи рівнянь;
- розробка обчислювального алгоритму і його програмна реалізація;
- перевірка працездатності та адекватності розробленої математичної моделі.

Якість розробленого модуля оцінюють за наступними показниками:

- точність результатів обчислень;
- надійність функціонування моделі;
- простота підготовки вхідних даних для розрахунків;
- повнота необхідної інформації, що міститься в результаті розрахунків;
- універсальність математичної моделі;
- можливість корекції моделі;
- область адекватності математичного опису;
- простота реалізації обчислювального процесу на ЕОМ;
- витрати машинного часу на реалізацію модуля;
- необхідний обсяг оперативної пам'яті ЕОМ.

Слід зазначити, що не всі приведені вимоги до модулів незалежні. Так, час обчислень на ЕОМ можна зменшити за рахунок підвищення вимог до обсягу пам'яті машини і навпаки. Чим більшою спільністю володіє модуль, тим, звичайно, складніші форми завдання вхідних даних. Точність результатів може бути підвищена шляхом ускладнення моделі, що спричиняє збільшення часу рахунку, а іноді і зниження надійності функціонування модуля за рахунок труднощів забезпечення збіжності обчислювальних операцій. Таким чином, при побудові модуля звичайно ідуть на розумний компроміс між складністю його структури і точністю одержуваних результатів.

Точність математичного моделювання ХТС у цілому і необхідну точність елементарних модулів оцінюють за результатами аналізу чутливості ХТС. Це дозволяє визначити елементи ХТС, зміни параметрів яких роблять найменший чи найбільший вплив на функціонування системи ХТС.

Для елементів, зміни параметрів яких найбільшою мірою впливають на чутливість, необхідно розробляти більш точні модулі.

Практика використання автономних модулів елементів ХТС виправдовує себе в основному при розрахунках окремих апаратів. Для розрахунків типових схем відділень і технологічних ліній більш ефективними виявляються в ряді випадків укрупнені математичні моделі процесів і апаратів. В складі систем автоматизованого розрахунку таких ХТС доцільно мати кілька бібліотек модулів, класифікованих за тією чи іншою ознакою:

- бібліотеку розрахунку систем теплообміну;
- бібліотеку розрахунку систем поділу багатокомпонентних сумішей;
- бібліотеку розрахунку хімічних реакторів;
- бібліотеку спрощених модулів;
- бібліотеку модулів техніко-економічних розрахунків і т. п.

Бібліотеки модулів зберігаються в системних бібліотеках ЕОМ і пристроях прямого доступу (магнітні диски). Для кожної бібліотеки складають список модулів, що доповнюються відповідними паспортами. З цією метою формуються спеціальні розділи в системних бібліотеках.

Паспорт модуля визначає можливість його застосування для рішення задач технологічних розрахунків. У паспорт можуть входити такі відомості, як область застосування модуля, види рівнянь математичного опису елемента і метод їхнього рішення, одиниці виміру вхідних і вихідних параметрів, список і характеристики супутніх підпрограм, можливість коректування і т. д.

4.2. ПОБУДОВА ДЕТЕРМІНОВАНИХ МАТЕМАТИЧНИХ ОПИСІВ ЕЛЕМЕНТІВ ХТС

Детерміновані математичні моделі відбивають закономірності процесів, що протікають в елементах ХТС. При розробці таких моделей використовують закони збереження енергії і маси, закони переносу речовини, енергії та імпульсу, закономірності кінетики хімічних реакцій, що протікають, гідродинаміку потоків і таке інше. При цьому використовується блоковий принцип побудови моделей, відповідно до якого математичний опис об'єкта в цілому одержують як сукупність описів окремих елементарних процесів, що протікають у розглянутому об'єкті.

Побудовану математичну модель перевіряють на адекватність експериментальним даним і, у разі потреби, коректують її параметри. Потім розробляють алгоритм рішення рівнянь і формують модуль у виді відповідної програми для ЕОМ.

Розглянемо методики побудови математичних описів деяких типових елементів ХТС.

4.2.1. Змішувач потоків

При складанні математичного опису змішувача потоків (рис. 4.1) скористаємося наступними допущеннями:

- структура потоку в апараті відповідає режиму ідеального змішання;
- режим змішання в апараті – сталий;
- усередині апарата відсутні джерела і стоки речовини і теплоти;
- число потоків, що змішуються, дорівнює 2; при необхідності змішання більшого числа потоків у схему включають декілька послідовно з'єднаних змішувачів;
- теплоємності компонентів i -го потоку розраховуються при температурі цього потоку.

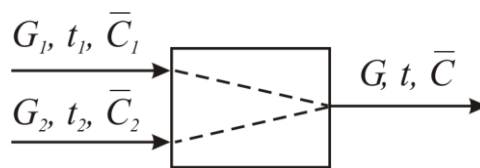


Рис. 4.1. Змішувач потоків: G_j, t_j, \bar{C}_j — витрата, температура і вектор концентрацій j -го технологічного потоку

Загальне рівняння матеріального балансу для змішувача двох потоків має вид

$$G = G_1 + G_2, \quad (4.1)$$

де G – витрата вихідного потоку; G_1, G_2 – витрати вхідних потоків.

Рівняння матеріального балансу i -го компонента

$$G \cdot C_i = G_1 \cdot C_{1i} + G_2 \cdot C_{2i};$$

$$i = 1, \dots, NK, \quad (4.2)$$

де C_i – масова частка i -ої речовини у вихідному потоці; C_{1i}, C_{2i} – масові частки i -ої речовини в першому і в другому вхідних потоках (елементи векторів \bar{C}_1 і \bar{C}_2); NK – число речовин у потоці.

Очевидно, що:

$$C_i = (G_1 C_{1i} + G_2 C_{2i}) / G. \quad (4.3)$$

Рівняння теплового балансу має вид

$$G C_p t = G_1 C_{p1} t_1 + G_2 C_{p2} t_2, \quad (4.4)$$

де C_p – питома теплоємність вихідного потоку; t – температура вихідного потоку; C_{p1}, C_{p2} – питомі теплоємності вхідних потоків; t_1, t_2 – температури вхідних потоків.

Звідси:

$$t = (G_1 C_{p1} t_1 + G_2 C_{p2} t_2) / G C_p. \quad (4.5)$$

Температурна залежність питомої теплоємності i -ої речовини у j -му потоці може бути представлена як функція температури

$$C_{p_{i,j}} = a_i + b_i t_j + d_i t_j^2 + e_i t_j^3, \quad (4.6)$$

де a_i , b_i , d_i , e_i – емпіричні коефіцієнти, знайдені для кожної речовини. Теплоємність j -го потоку обчислюється за правилом адитивності:

$$C_{p_j} = \sum_{i=1}^{NK} C_{p_{ij}} C_{ji}. \quad (4.7)$$

Для рішення рівняння (4.5) скористаємося методом простої ітерації:

$$t^{k+1} = (G_1 C_{p1}(t^k) t_1 + G_2 C_{p2}(t^k) t_2) / G C_p(t^k), \quad (4.8)$$

де $k = 0, 1, 2, \dots$ – номер ітерації.

Умова закінчення розрахунку: $|t^{k+1} - t^k| < \varepsilon$.

Як початкове наближення можна прийняти: $t^0 = (t_1 + t_2) / 2$.

4.2.2. Роздільник потоків

При складанні математичної моделі роздільника (*рис. 4.2*) приймаються ті ж допущення, що і при виводі математичної моделі змішувача.

З урахуванням допущень математична модель має вид:

$$G_1 = G_2 + G_3$$

$$t_1 = t_2 = t_3$$

$$\bar{C}_1 = \bar{C}_2 = \bar{C}_3. \quad (4.9)$$

Співвідношення вихідних потоків описується коефіцієнтами поділу

$$R_2 = G_2 / G_1; \quad R_3 = G_3 / G_1. \quad (4.10)$$

Витрати k -го вихідного потоку знаходять множенням витрат вхідного потоку на коефіцієнт поділу. Коефіцієнт поділу задається для кожного потоку і є k -м параметром апарата. Сума коефіцієнтів повинна дорівнювати 1.

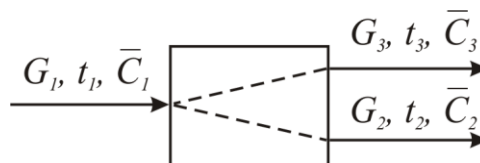


Рис. 4.2. Роздільник потоків: G_j , t_j , \bar{C}_j — витрата, температура і вектор концентрацій j -го технологічного потоку

Дана модель роздільника описує процес поділу потоків без зміни їхнього складу (простий роздільник).

4.2.3. Теплообмінник

При побудові математичного опису допустимо, що:

- розглядається кожухотрубчастий теплообмінник у стаціонарному режимі;
- теплопередача не супроводжується зміною агрегатного стану теплоносіїв;
- утрати теплоти не враховуються;
- схема руху теплоносіїв протитічйна (*рис. 4.3*);
- коефіцієнти тепловіддачі в трубному і міжтрубному просторах розраховуються при початкових температурах теплоносіїв.

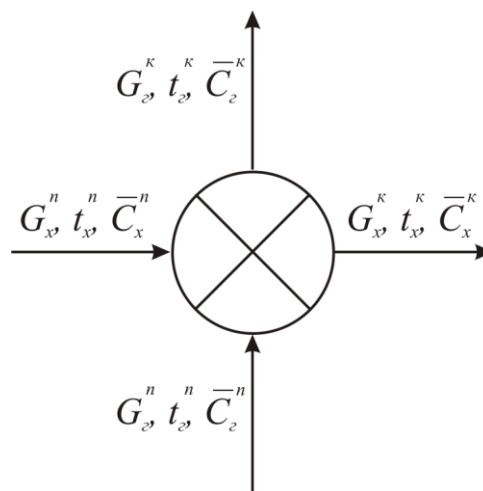


Рис. 4.3. Вхідні і вихідні параметри теплообмінника:
G – витрата; t – температура; \bar{C}_j – вектор концентрацій

Теплоносій, що віддає теплоту («гарячий» потік), направляємо в труби, а теплоносій, що сприймає теплоту («холодний» потік), у міжтрубний простір. Тому що теплообмінник не змінює сполуки матеріальних потоків, то:

$$G_{\Gamma}^k = G_{\Gamma}^n; \quad G_x^k = G_x^n; \quad C_{\Gamma_i}^k = C_{\Gamma_i}^n; \quad C_{x_i}^k = C_{x_i}^n; \quad i = 1, \dots, NK. \quad (4.11)$$

Тут G – витрата теплоносія; C – концентрація речовини; індекси k і n означають кінцевий і початковий стани, а Γ і x – гарячий і холодний потоки.

Кількість теплоти, передана через стінку, дорівнює

$$Q = k_T F \frac{\Delta t_2 - \Delta t_1}{\ln(\Delta t_2 / \Delta t_1)}. \quad (4.12)$$

де k_T – коефіцієнт теплопередачі; F – площа поверхні теплообміну;

$$\Delta t_2 = t_{\Gamma}^n - t_x^k; \quad \Delta t_1 = t_{\Gamma}^k - t_x^n.$$

Кількість переданої теплоти може бути визначена з використанням водяних еквівалентів:

- віддана гарячим теплоносієм — $Q = w_{\Gamma} (t_{\Gamma}^{\Pi} - t_{\Gamma}^{\text{K}})$;
- сприйнята холодним теплоносієм — $Q = w_{\text{X}} (t_{\text{X}}^{\text{K}} - t_{\text{X}}^{\Pi})$,

де $w_{\Gamma} = G_{\Gamma}^{\Pi} C_{p_{\Gamma}}$, $w_{\text{X}} = G_{\text{X}}^{\Pi} C_{p_{\text{X}}}$ – водяні еквіваленти.

Рівняння теплового балансу теплообмінника має вид:

$$w_{\Gamma} (t_{\Gamma}^{\Pi} - t_{\Gamma}^{\text{K}}) = w_{\text{X}} (t_{\text{X}}^{\text{K}} - t_{\text{X}}^{\Pi}). \quad (4.13)$$

З рівняння (4.13) знаходимо:

$$t_{\Gamma}^{\text{K}} = t_{\Gamma}^{\Pi} - (t_{\text{X}}^{\text{K}} - t_{\text{X}}^{\Pi}) / N; \quad (4.14)$$

$$N = w_{\Gamma} / w_{\text{X}}.$$

Оскільки втратами теплоти зневажаємо, то:

$$w_{\Gamma} (t_{\Gamma}^{\Pi} - t_{\Gamma}^{\text{K}}) = k_{\Gamma} F \frac{(t_{\Gamma}^{\Pi} - t_{\text{X}}^{\text{K}}) - (t_{\Gamma}^{\text{K}} - t_{\text{X}}^{\Pi})}{\ln((t_{\Gamma}^{\Pi} - t_{\text{X}}^{\text{K}}) / (t_{\Gamma}^{\text{K}} - t_{\text{X}}^{\Pi}))}. \quad (4.15)$$

Підставивши (4.14) у (4.15) і виконавши перетворення, одержимо:

$$t_{\text{X}}^{\text{K}} = t_{\text{X}}^{\Pi} + (t_{\Gamma}^{\Pi} - t_{\text{X}}^{\Pi}) \cdot N \frac{\exp(M(1-N)) - 1}{\exp(M(1-N)) - N}; \quad (4.16)$$

$$M = k_{\Gamma} F / w_{\Gamma}.$$

Коефіцієнт теплопередачі розраховують за формулою

$$k_{\Gamma} = \frac{1}{1/\alpha_{\text{TP}} + \sum r_{\text{CT}} + 1/\alpha_{\text{M}}}, \quad (4.17)$$

де α_{TP} і α_{M} – коефіцієнти тепловіддачі в трубному і міжтрубному просторах; $\sum r_{\text{CT}}$ – сума термічних опорів стінки.

Коефіцієнти тепловіддачі в трубному і міжтрубному просторах розраховуються за відповідними формулами. Рівняння (4.16) і (4.14) дозволяють визначити параметри вихідних потоків теплообмінника.

4.2.4. Абсорбер

Математична модель абсорбера може бути представлена в наступному виді:

$$G_{\text{nk}}^{\Gamma} = (1 - \beta) G_{\text{ik}}^{\Gamma}, \quad (4.18)$$

$$G_{mk}^p = \beta G_{ik}^g + G_{jk}^p, \quad (4.19)$$

$$T_{\text{вих}}^g = T_{\text{вх}}^g - \Delta t_1,$$

$$T_{\text{вих}}^p = T_{\text{вх}}^p + \Delta t_2, \quad (4.20)$$

де β – ступінь абсорбції; Δt_1 , Δt_2 – зміни температур у газовому потоці та в абсорбенті; індекси G і T відносяться до газу і рідини; індекси i і n – вхідного і вихідного газового потоків; j і m – індекси вхідного і вихідного потоків рідини. Як обчислювальний блок для абсорбера можна скористатися модулем роздільника. Схема потоків в абсорбері приведена на **рис. 4.4**.

Витрата k -ої речовини з вихідними потоками розраховується за рівняннями:

Рідина

$$G_{mk} = \lambda_{ik} G_{ik} + \delta_{jk} G_{jk}; \quad (4.21)$$

Газ

$$G_{nk} = (1 - \lambda_{ik}) G_{ik} + (1 - \delta_{jk}) G_{jk}; \quad (4.22)$$

де $0 \leq \lambda_{ik} \leq 1$; $0 \leq \delta_{jk} \leq 1$; $k = 1, 2, \dots, nk$; nk – число компонентів у потоці.

Рівняння (4.19) і (4.18) є, відповідно, окремими випадками рівнянь (4.21) і (4.22). Якщо $\delta_{jk} = 1$, то рівняння (4.21) приймає вид (4.19), а (4.22) вид (4.18). Коефіцієнти поділу, а також Δt_1 , Δt_2 є параметрами модуля.

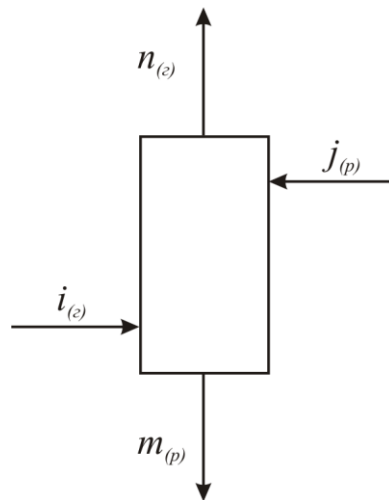


Рис. 4.4. Схема потоків в абсорбері

Послідовність параметрів повинна бути погоджена з порядком розташування параметрів стану потоків. Першим вхідним і вихідним потоком повинний бути потік газу, другим – потік рідини.

4.2.5. Реактор

Лінійна модель реактора має наступний вид:

$$G_{\text{вих}} = G_{\text{вх}} \quad (4.23)$$

$$G_{\text{вих } j} = G_{\text{вх } j} + r_j \alpha G_{\text{вх кл}}; \quad j = 1, 2, \dots, nk \quad (4.24)$$

$$T_{\text{вих}} = p \cdot T_{\text{вх}}, \quad (4.25)$$

де r_j – видатковий коефіцієнт для j -го компонента; $G_{\text{вх кл}}$, α – витрата і ступінь перетворення ключового компонента; p – коефіцієнт статистичного рівняння, отриманий у результаті обробки результатів показників функціонування виробництв-аналогів.

4.3. МАТЕМАТИЧНІ МОДЕЛІ ХІМІЧНИХ РЕАКТОРІВ І АЛГОРИТМИ РІШЕННЯ

4.3.1. Модель реактора ідеального змішання

Особливістю моделі реактора ідеального змішання (РІЗ) є те, що концентрація і температура однакові по всьому об'єму реактора і дорівнюють відповідним значенням на виході (тобто $C_{\text{вих}} = C$, $T_{\text{вих}} = T$). Математична модель будується для реактора в цілому. Для спрощення прийнято, що $Q_{\text{вх}} = Q_{\text{вих}} = Q$. Схематично модель РІЗ приведено на *рис. 4.5*.

Позначимо:

Q – об'ємна витрата, $\text{м}^3/\text{с}$;

C – концентрація компонента, $\text{моль}/\text{м}^3$;

T – температура, К ;

T_x – температура холодоагенту, К ;

V – об'єм реактора, м^3 ;

S – поверхня теплообміну, м^2 ;

W – швидкість хімічного перетворення, $\text{моль}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})$

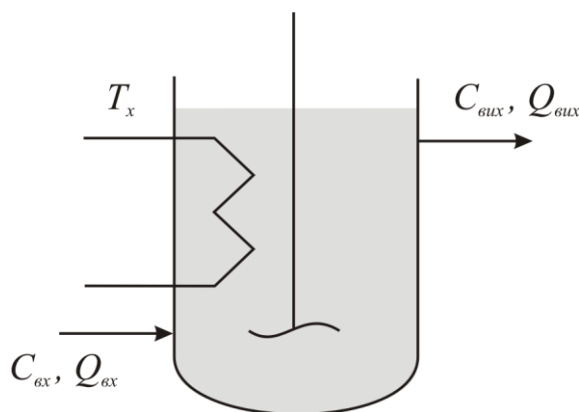


Рис. 4.5. Реактор ідеального змішання

Індекси: ВХ і ВИХ відповідають вхідним і вихідним параметрам.

Рівняння матеріального балансу РІЗ, записане на основі закону збереження кількості речовини, має вид:

$$Q \cdot (C_{\text{ВХ}} - C_{\text{ВИХ}}) - V \cdot W = V \frac{dC}{dt}. \quad (4.26)$$

Енергетичний баланс записується на основі закону збереження енергії і має вид:

$$QC_p \rho (T_{\text{ВХ}} - T_{\text{ВИХ}}) + V \cdot W(-\Delta H) - k_T S(T - T_x) = VC_A \frac{dT}{dt}, \quad (4.27)$$

де C_p – теплоємність реакційної суміші, кДж/(кг·К); ρ – густина реакційної суміші, кг/м³; k_T – коефіцієнт теплопередачі, Вт/(м²·К); C_A – усереднена об'ємна теплоємність апарата, кДж/(м³·К).

$$C_A = C_R \cdot X_R \cdot \rho_R + C_P \cdot X_P \cdot \rho_P + C_K \cdot X_K \cdot \rho_K,$$

де X_R, X_P, X_K – частка загального обсягу, займаного внутрішніми конструкціями реактора, реакційним середовищем і каталізатором, відповідно; C_R, C_P, C_K – теплоємності матеріалу реактора, реакційного середовища і каталізатора, відповідно; ρ_R, ρ_P, ρ_K – густина матеріалу реактора, реакційного середовища і каталізатора, відповідно.

Рівняння кінетики. У загальному виді швидкість реакції визначається як функція сполуки і температури реакційної суміші:

$$W = F(\bar{C}, T), \quad (4.28)$$

де \bar{C} – вектор концентрацій, T – температура.

Початкові умови визначають значення температур і концентрацій у початковий момент часу, що, взагалі говорячи, може бути обраний довільно.

$$t = 0: C = C_{\text{поч}}; T = T_{\text{поч}}. \quad (4.29)$$

Обмеження визначають діапазон параметрів, у яких працює реактор:

$$T_{\min} < T < T_{\max}$$

(T_{\min} і T_{\max} – робочий діапазон температур);

$$C_{\text{ВХ}}^{\min} < C_{\text{ВХ}} < C_{\text{ВХ}}^{\max}$$

($C_{\text{ВХ}}^{\min}$ і $C_{\text{ВХ}}^{\max}$ – робочий діапазон вхідних концентрацій);

$$Q_{\min} < Q < Q_{\max}$$

(Q_{\min} і Q_{\max} – робочий діапазон об'ємної витрати) і т.д.

Стаціонарний режим характеризується сталими значеннями параметрів, тому для його опису можна користуватися **статичною моделлю**

РІЗ, у якій доданки, що враховують зміну речовини і тепла в часі (праві частини рівнянь), дорівнюють нулю:

$$\frac{dC}{dt} = \frac{dT}{dt} = 0.$$

Інші рівняння моделі не змінюються. Таким чином, статична модель РІЗ являє собою систему алгебраїчних рівнянь. Вирішити подібну систему можна будь-яким методом рішення систем лінійних рівнянь (методи Гауса, Зейделя та ін.). Для рішення рівнянь, що описують нестационарний режим, використовуються методи рішення систем звичайних диференціальних рівнянь.

4.3.2. Модель реактора ідеального витиснення

Характерною рисою реактора ідеального витиснення (РІВ) є те, що в ньому не відбувається змішання уздовж напрямку руху потоку. У будь-якому поперечному перерізі реактора частки мають однакову швидкість руху.

Так як у РІВ параметри міняються з довжиною реактора, то для виводу рівнянь балансів виділяється елементарний обсяг шару висотою dz (рис. 4.6).

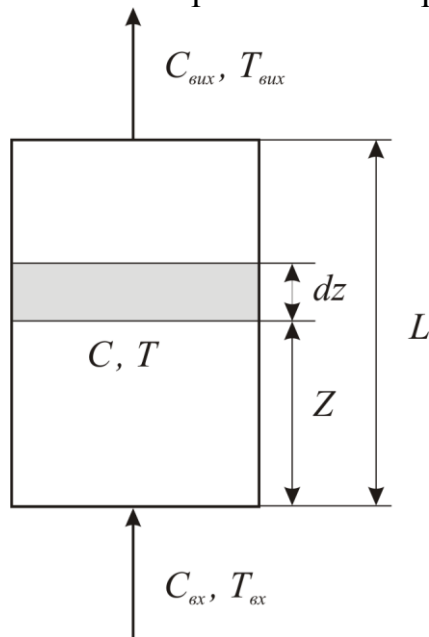


Рис. 4.6. Реактор ідеального витиснення

Введемо наступні позначення:

L, S – довжина і перетин реактора, м і m^2 , відповідно;

U – лінійна швидкість потоку, м/с;

$Q = U \cdot S$ – об'ємна витрата, m^3/c ;

$dV = S \cdot dz$ – обсяг виділеного елементарного шару, m^3 ;

$C_{вх}, T_{вх}$ – концентрація і температура на вході в шар;

C, T – концентрація і температура на вході у виділений елементарний шар.

Інші позначення аналогічні попередній моделі.

Рівняння матеріального балансу для РІВ:

$$-U \frac{dC}{dZ} \pm W = \frac{dC}{dt}. \quad (4.30)$$

У рівнянні 4.30 перший доданок враховує кількість речовини, що переноситься з потоком, другий – кількість речовини, що витрачається (утвориться) в результаті хімічного перетворення. Права частина враховує зміну кількості речовини у виділеному елементарному шарі.

Енергетичний баланс для РІВ у припущенні, що C_p і ρ – постійні у всьому обсягу реактора, має вид:

$$-UC_p \rho \frac{dt}{dZ} + W(-\Delta H) = C_A \frac{dT}{dt}. \quad (4.31)$$

Фізичний зміст доданків аналогічний (4.30).

У математичну модель РІВ входять також рівняння кінетики та обмеження (такі ж, як у попередній моделі), а також початкові і граничні умови.

Граничні умови для РІВ – умови протікання процесу на вході в шар.

$$Z = 0: C = C_{вх}; T = T_{вх}. \quad (4.32)$$

Початкові умови встановлюють значення концентрації і температури в реакторі в початковий момент часу.

$$t = 0; C = C(Z); T = T(Z). \quad (4.33)$$

При описі стаціонарних режимів у рівняннях балансів похідні за часом прирівнюються нулю. У цьому випадку система рівнянь матеріальних і теплових балансів являє собою систему звичайних диференціальних рівнянь. Найбільш розповсюдженими на практиці рішеннями подібних систем є методи Рунге-Кутта різного порядку точності. Достоїнством цих методів є те, що при їхньому використанні не потрібно обчислювати похідні вище першого порядку, а їхній основний недолік – значний обсяг обчислень на кожному кроці.

Метод Рунге-Кутта четвертого порядку точності – один із самих уживаних методів інтегрування диференціальних рівнянь. Звичайно його називають просто «методом Рунге-Кутта». Цей метод описується так:

$$Y_{i+1} = Y_i + h/6 \cdot (K_1 + 2 \cdot K_2 + 2 \cdot K_3 + K_4),$$

де

$$K_1 = f(X_i, Y_i),$$

$$K_2 = f(X_i + h/2, Y_i + h \cdot K_1/2),$$

$$K_3 = f(X_i + h/2, Y_i + h \cdot K_2/2),$$

$$K_4 = f(X_i + h, Y_i + h \cdot K_3),$$

де h – крок по координаті.

Інтегрування за методом Рунге-Кутта полягає в наступному. Для кожної i -ої крапки ($i = 1, 2, \dots, n-1$) обчислюються значення K_j ($j = 1, 2, 3, 4$). Потім послідовно визначаються значення Y_i ($i = 1, 2, \dots, n$).

4.3.3. Дифузійна модель з подовжнім переносом речовини і тепла

Часто не вдається описати процес, що протікає в промисловому реакторі, ідеальними моделями. Очевидно, що в такому випадку ми маємо справу з деяким проміжним випадком, де має місце неповне змішання в потоці, тобто на режим ідеального витиснення накладається часткове перемішування.

Спочатку розглянемо одномірний випадок – перенос речовини (енергії) здійснюється тільки в подовжньому напрямку. Така модель одержала назву однопараметрична дифузійна модель (*рис. 4.7*). Характер процесів переносу визначається двома складовими:

- 1) конвективною – відповідною режиму ідеального витиснення;
- 2) дифузійною, якою описується спільний вплив різних факторів, що виражається у відході одних часток потоку вперед і відставанні інших.

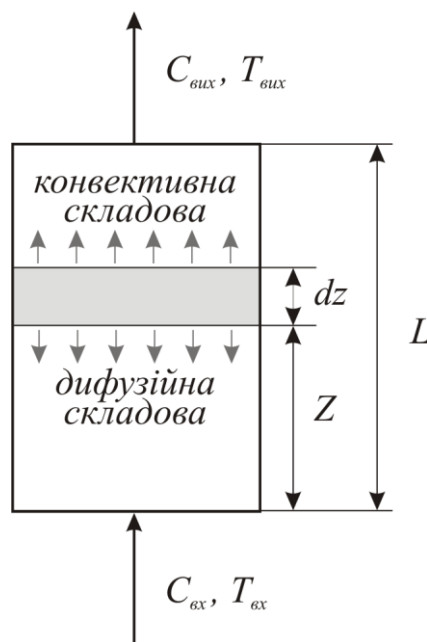


Рис. 4.7. Однопараметрична дифузійна модель

Рівняння матеріального балансу:

$$-U \frac{\partial C}{\partial Z} + D_1 \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} - W = \frac{\partial C}{\partial t}. \quad (4.34)$$

Перший доданок враховує перенос речовини за рахунок конвективного потоку, другий – за рахунок дифузійного потоку, третій – за рахунок хімічної реакції.

Рівняння енергетичного балансу:

$$\lambda_l \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - UC_p \rho \frac{\partial T}{\partial Z} + W(-\Delta H) = C_A \frac{\partial T}{\partial t}, \quad (4.35)$$

де D_l і λ_l – ефективні коефіцієнти подовжньої дифузії (m^2/c) і теплопровідності ($Вт/(м\cdot K)$), відповідно.

Рівняння кінетики, початкові умови й обмеження аналогічні моделі РІВ.

Крайові (*граничні*) умови необхідно задавати як на вході, так і на виході з реактора. Для складання цих умов у загальному випадку необхідно скласти матеріальний і тепловий баланси для вхідного і вихідного перетинів реактора. На відміну від балансів, виведених для елементарного обсягу, у даному випадку не враховуються зміни за рахунок хімічної реакції і накопичення, тому що товщина шару $dz = 0$ і, отже, доданки, утримуючі dz , також дорівнюють 0.

Граничні умови на вході в шар:

$$Z = 0: U(C - C_{\text{вх}}) = D_l \frac{dC}{dZ}; (UC_p \rho (T - T_{\text{вх}})) = \lambda_l \frac{dT}{dZ}. \quad (4.36)$$

При $Z = L$, тобто на виході з реактора, як правило, швидкість хімічного перетворення вкрай мала, оскільки процес виходить або на повну, або на рівноважну ступінь перетворення. Отже, градієнти температур і концентрацій відсутні. Тому можна записати:

$$Z = L: \frac{dC}{dZ} = 0; \frac{dT}{dZ} = 0. \quad (4.37)$$

4.3.4. Двопараметрична дифузійна модель

На відміну від попередньої моделі, що враховує зміну концентрацій і температури тільки в подовжньому напрямку, двопараметрична модель враховує зміну цих параметрів ще й у радіальному напрямку. Дана модель використовується, в основному, для опису процесів у трубчастих реакторах.

Для опису радіального переносу використовуються D_r , λ_r – ефективні коефіцієнти дифузії і теплопровідності в радіальному напрямку. Інші позначення аналогічні попередній моделі.

Рівняння матеріального балансу має вид:

$$-U \frac{\partial C}{\partial Z} + D_l \frac{\partial^2 C}{\partial Z^2} - W + D_r \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right) = \frac{\partial C}{\partial t}. \quad (4.38)$$

Перші три доданки цілком аналогічні однопараметричній дифузійній моделі. Четвертий доданок враховує перенос речовини за рахунок радіальної дифузії. В останньому доданку $\frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r}$ враховується зміна площі поперечного перерізу від ступеня видалення від центра трубки.

Рівняння енергетичного балансу має вид:

$$-UC_p \rho \frac{\partial T}{\partial Z} + W(-\Delta H) + \lambda_l \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \lambda_r \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) = C_A \frac{\partial T}{\partial t}. \quad (4.39)$$

Кінетичне рівняння і початкові умови такі ж, як і в попередній моделі. До граничних умов однопараметричної дифузійної моделі (4.36) і (4.37) додаються умови при $r = 0$ і $r = R$:

$$r = 0: \quad \frac{dC}{dr} = 0; \quad \frac{dT}{dr} = 0;$$

$$r = R: \quad \frac{dC}{dr} = 0; \quad \lambda_R \frac{dT}{dr} = k_T \cdot (T - T_x). \quad (4.40)$$

де D_r , λ_r – ефективні коефіцієнти радіальної дифузії (m^2/c) і радіальної теплопровідності ($Вт/м \cdot K$), відповідно; k_T – коефіцієнт теплопередачі від шару каталізатора до холодоагенту, $Вт/(m^2 \cdot K)$.

4.3.5. Двофазна модель процесу в шарі каталізатора

При моделюванні процесів у шарі необхідно враховувати ряд особливостей:

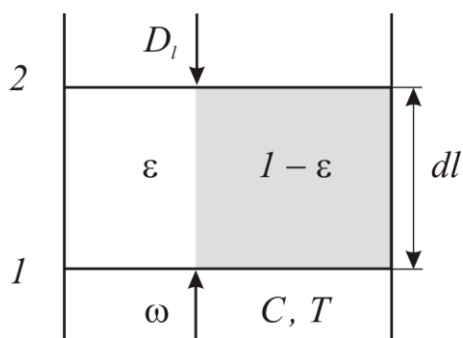
- 1) наявність двох фаз: твердої – зерна каталізатора і газоподібної (рідкої) – потік реакційної суміші;
- 2) температура і концентрації компонентів у газовій і твердій фазах можуть розрізнятися дуже значно;
- 3) перенос тепла по шару здійснюється як у твердій фазі, так і у потоці реагентів, а перенос речовини – тільки у потоці реагентів.

Для більшості промислових процесів у залежності від співвідношення висоти шару каталізатора (L) до діаметра (D) стає можливим не враховувати ті чи інші елементарні процеси. Так, якщо $L > D$, істотне значення мають процеси переносу в радіальному напрямку і передачі тепла через стінку апарата, а при $L \gg D$, як правило, можна зневажити процесами переносу в подовжньому напрямку за рахунок дифузії і теплопровідності. Процес в апараті такого типу може бути описаний двопараметричною дифузійною моделлю за умови, що $D_L = 0$.

Для апаратів, коли $L < D$, картина міняється: процесами радіального переносу і теплопроводу через стінку часто можна зневажити, а процеси

подовжнього переносу грають дуже помітну роль. Розглянемо більш докладно останній випадок.

Якщо процеси переносу між зовнішньою поверхнею зерна каталізатора і ядром потоку не роблять помітного впливу на показники процесу, тобто відбувається інтенсивний тепло- і масообмін між фазами, то для опису процесу в цьому випадку можна використовувати однопараметричну дифузійну модель. У випадку досить великих лінійних швидкостей потоку і високих шарів каталізатора внесок дифузійної складової дуже незначний і для опису процесу в шарі каталізатора можна використовувати модель РІВ.



Коли вплив зовнішнього тепло- і масообміну істотний, тоді в цьому випадку використовується двофазна модель для опису процесів у шарі каталізатора. Схематично дану модель можна представити таким чином (рис. 4.8). Шар поділяється на дві частини – тверда фаза (зерна каталізатора) і вільний об'єм, по якому проходить весь потік реагентів. Хімічне перетворення відбувається тільки у твердій фазі.

Прийнято наступні позначення:

Рис. 4.8. Двофазна модель

ε – частка вільного об'єму шару;

dF – поверхня обміну між фазами у виділеному елементарному об'ємі шару висотою dl , m^2/m^3 ;

$\lambda_{ск}$ – ефективний коефіцієнт теплопровідності по твердій фазі, $Вт/(м \cdot К)$;

α_M, α_T – коефіцієнти масо- ($м/с$) і теплообміну ($Вт/(м^2 \cdot К)$), відповідно;

C_3, T_3 – концентрація ($моль/м^3$) і температура ($К$) на зерні каталізатора;

C_K – теплоємність каталізатора, $Дж/(м^3 \cdot К)$;

W – швидкість хімічного перетворення, що спостерігається, віднесена до одиниці об'єму шару, $моль/(м^3 \cdot с)$.

Інші позначення аналогічні дифузійній моделі.

Математичний опис процесу має наступний вид:

1. **Матеріальний баланс у газовій фазі** враховує процеси переносу маси за рахунок дифузійного і конвективного потоків і масообмін між фазами.

$$D_1 \cdot \varepsilon \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial l^2} - \omega \cdot \frac{\partial C}{\partial l} + \alpha_M \cdot S_{уд} \cdot (C_3 - C) = \varepsilon \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4.41)$$

2. **Тепловий баланс у газовій фазі** враховує процеси переносу тепла за рахунок подовжньої теплопровідності, конвективного потоку і теплообміну між фазами. Висновок аналогічний попередньому.

$$\lambda_1 \cdot \varepsilon \cdot \frac{\partial^2 T}{\partial l^2} - \omega \cdot \frac{\partial T}{\partial l} + \alpha_T \cdot S_{уд} \cdot (T_3 - T) = \varepsilon \cdot \frac{\partial T}{\partial t} \quad (4.42)$$

3. **Матеріальний баланс у твердій фазі** враховує перенос речовини між фазами за рахунок масообміну і хімічне перетворення:

$$\alpha_M \cdot S_{уд} \cdot (C - C_3) - W = \varepsilon_k \cdot \frac{\partial C_3}{\partial t}. \quad (4.43)$$

4. **Тепловий баланс у твердій фазі** враховує процеси переносу тепла за рахунок теплопровідності і теплообміну між фазами, виділення тепла за рахунок хімічної реакції:

$$\frac{\lambda_{ск} \cdot (1 - \varepsilon)}{C_p \cdot \rho} \cdot \frac{\partial^2 T_3}{\partial \ell^2} - \frac{\alpha_T \cdot S_{уд}}{C_p \cdot \rho} \cdot (T - T_3) + \frac{W \cdot (-\Delta H)}{C_p \cdot \rho} = \frac{C_k \cdot (1 - \varepsilon)}{C_p \cdot \rho} \cdot \frac{\partial T_3}{\partial t}. \quad (4.44)$$

5. **Рівняння кінетики, початкові умови й обмеження** аналогічні дифузійній моделі. Граничні умови мають наступний вид:

$$\begin{aligned} \ell = 0: \quad & \omega(C - C_3) = D_\ell \cdot \varepsilon \cdot \frac{\partial C}{\partial \ell}; \\ & \omega(T - T_3) = \frac{\lambda_\ell \cdot \varepsilon}{C_p \rho} \cdot \frac{\partial C}{\partial \ell}; \\ & \lambda_{ск} \frac{\partial T_3}{\partial \ell} = \alpha_T^* (T_3 - T_{вх}) \\ \ell = L: \quad & \frac{\partial C}{\partial \ell} = \frac{\partial T}{\partial \ell} = \frac{\partial T_3}{\partial \ell} = 0, \end{aligned} \quad (4.45)$$

де α_T^* – коефіцієнт тепловіддачі за рахунок вільної конвекції.

Система рівнянь (4.41–4.45) являє собою двофазну математичну модель процесу в нерухомому шарі каталізатора. Дану модель використовують при моделюванні процесів, для яких істотне значення має зовнішній тепло- і масообмін, а також для розрахунку перехідних режимів.

Розглянуті вище моделі використовуються для розрахунку різних хімічних реакторів у залежності від типу реактора, процесу, що протікає в ньому, і поставленої мети дослідження.

Приведені математичні моделі реакторів містять, як правило, диференціальні рівняння першого і другого порядків. Для рішення систем диференціальних рівнянь першого порядку використовують метод Рунге-Кутта і його модифікації (див. 4.3.2). Методи рішення диференціального рівняння другого порядку будуть розглянуті нижче.

4.3.6. Методи рішення лінійної крайової задачі для звичайних диференціальних рівнянь

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ: Нехай дано лінійне диференціальне рівняння (ЛДР) другого порядку:

$$y'' + P(x) y' + g(x) \cdot y = f(x), \quad (4.46)$$

де $P(x)$, $g(x)$, $f(x)$ – відомі неперервні на відрізку $[a, b]$ функції.

Лінійна крайова задача для (4.46) складається в знаходженні функції $y=y(x)$, що всередині відрізка $[a,b]$ задовольняє рівнянню (1), а на його кінцях – лінійним крайовим умовам.

$$\begin{aligned}\alpha_0 \cdot y(a) + \alpha_1 \cdot y'(a) &= A \\ \beta_0 \cdot y(b) + \beta_1 \cdot y'(b) &= B,\end{aligned}\tag{4.47}$$

де $\alpha_0, \alpha_1, \beta_0, \beta_1$ – задані постійні, причому $\alpha_0, \alpha_1, \beta_0, \beta_1$ не рівні одночасно нулю ($|\alpha_0| + |\alpha_1| \neq 0$; $|\beta_0| + |\beta_1| \neq 0$).

Якщо $A = B = 0$, то крайові умови (4.47) називаються однорідними. Лінійна крайова задача називається *однорідною*, якщо однорідні ЛДР (4.46) ($f(x) = 0$) і крайові умови (4.47).

Оскільки умови (4.47) повинні виконуватися в двох точках – на кінцях інтервалу $[a,b]$, їх називають *двохточечними крайовими умовами*, а крайову задачу – *двохточечною крайовою задачею*.

Точне рішення крайової задачі можливо знайти в рідких випадках. Тому на практиці часто використовують наближені методи рішення, які можна розбити на дві групи: а) *аналітичні*; б) *різницеві*.

Розглянемо один з різницевих методів – *метод кінцевих різниць*.

4.3.6.1. Метод кінцевих різниць

Одним з найбільш простих методів рішення лінійної крайової задачі (4.46–4.47) є зведення її до системи кінцево–різницевих рівнянь.

Класичне визначення похідної функції одної змінної записується у виді:

$$\frac{\partial y}{\partial x} = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{y(x+h) - y(x)}{h} \quad \text{при } h \rightarrow 0.$$

Природно, на ЕОМ ми не можемо зробити граничного переходу. З іншого боку, ми можемо додати h деяке мале, хоча і ненульове значення і перевірити, що *наближення виходить досить точним (проблема точності)* і що *помилка не зростає в ході процесу обчислень (проблема стійкості)*.

Цей метод (кінцевих різниць) зводиться до того, що ми заміняємо похідну різницею.

Розіб'ємо відрізок $[a,b]$ на n рівних частин довжиною h (крок).

$$h = (b-a)/n.$$

Позначимо точки розподілу відрізка $[a,b]$

$$x_0 = a; \quad x_n = b; \quad x_i = x_0 + i \cdot h \quad (i = 1, 2, \dots, n-1);$$

$$P_i = P(x_i); \quad g_i = g(x_i); \quad f_i = f(x_i);$$

$$y_i = y(x_i); \quad y_i' = y'(x_i); \quad y_i'' = y''(x_i).$$

Замінімо приблизно в кожній внутрішній точці x_i відрізка $[a,b]$ похідні y_i' і y_i'' кінцево–різницевими відносинами:

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}; \quad y_i'' = \frac{y_{i+2} - 2 \cdot y_{i+1} + y_i}{h^2}.\tag{4.48}$$

Для граничних точок $x_0 = a$ і $x_n = b$ покладемо:

$$y'_0 = \frac{y_1 - y_0}{h}; \quad y'_n = \frac{y_n - y_{n-1}}{h}. \quad (4.49)$$

Використовуючи формули (4.48) і (4.49), *приблизно замінимо* рівняння (4.46) і крайові умови (4.47) *системою $n+1$ лінійних алгебраїчних рівнянь з $n+1$ невідомими* $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$, що представляють собою значення шуканої функції $y = y(x)$ у точках $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$.

$$\frac{y_{i+2} - 2 \cdot y_{i+1} + y_i}{h^2} + P_i \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + g_i \cdot y_i = f_i \quad (i = 0; 1; 2; \dots n-2)$$

$$\alpha_0 \cdot y(a) + \alpha_1 \cdot \frac{y_1 - y_0}{h} = A$$

$$\beta_0 \cdot y(b) + \beta_1 \cdot \frac{y_n - y_{n-1}}{h} = B. \quad (4.50)$$

Вирішивши цю систему, можна одержати таблицю наближених значень шуканої функції $y = y(x)$.

На практиці часто похідні y_i' і y_i'' у внутрішніх точках x_i відрізка $[a, b]$ заміняють центрально-різницевиими відносинами:

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2 \cdot h}, \quad y_i'' = \frac{y_{i+2} - 2 \cdot y_{i+1} + y_i}{h^2}, \quad (4.51)$$

а для граничних точок $x_0 = a$ і $x_n = b$, як і раніше, справедливі формули (4.49). Тоді система рівнянь для визначення y_0, y_1, \dots, y_n здобуває вид:

$$\frac{y_{i+1} - 2 \cdot y_i + y_{i-1}}{h^2} + P_i \frac{y_{i+1} - y_{i-1}}{2 \cdot h} + g_i \cdot y_i = f_i \quad (i = 1; 2; \dots n-1)$$

$$\alpha_0 \cdot y(a) + \alpha_1 \cdot \frac{y_1 - y_0}{h} = A$$

$$\beta_0 \cdot y(b) + \beta_1 \cdot \frac{y_n - y_{n-1}}{h} = B. \quad (4.52)$$

Для оцінки погрішності методу кінцевих різниць на практиці звичайно застосовують наступну наближену рівність:

$$y_i^* - y(x_i) = 1/3[y_i^* - y_i], \quad (4.53)$$

де $y(x_i)$ – значення точного рішення крайової задачі в точці $x = x_i$; y_i – значення наближеного рішення, обчисленого в точці $x = x_i$ з кроком h ; y_i^* – значення наближеного рішення, обчисленого в точці $x = x_i$ з кроком $h/2$.

Щоб знайти наближене рішення крайової задачі з заданою точністю ϵ , необхідно зробити обчислення з кроком h і $h/2$ і порівняти отримані результати.

Якщо $|y_i^* - y_i| < 3 \cdot \varepsilon$, то, отже, $|y_i^* - y(x_i)| < \varepsilon$ і значення y_i^* ($i = 1, 2, \dots, n$) можна прийняти за рішення краєвої задачі.

4.3.6.2. Метод прогону

При великому n безпосереднє рішення систем (4.50) чи (4.52) стає досить громіздким. Для рішення систем такого виду був розроблений спеціальний метод, що одержав назву **метод прогону**.

Нехай маємо систему (4.50). Розглянемо перше $n-1$ рівняння:

$$\frac{y_{i+2} - 2 \cdot y_{i+1} + y_i}{h^2} + P_i \frac{y_{i+1} - y_i}{h} + g_i y_i = f_i \quad (i = 0; 1; 2; \dots n-2).$$

Перетворивши, одержимо:

$$y_{i+2} + (-2 + h \cdot P_i)y_{i+1} + (1 - h \cdot P_i + h^2 \cdot g_i)y_i = h^2 \cdot f_i. \quad (4.54)$$

Уведемо позначення:

$$m_i = -2 + h \cdot P_i; \quad k_i = 1 - h \cdot P_i + h^2 \cdot g_i \quad (i=0, 1, 2, \dots, n-2). \quad (4.55)$$

Тоді (4.54) замінюється у виді:

$$y_{i+2} + m_i \cdot y_{i+1} + k_i \cdot y_i = h^2 \cdot f_i. \quad (4.56)$$

Вирішивши (4.56) відносно y_{i+1} , одержимо:

$$y_{i+1} = \frac{h^2}{m_i} f_i - \frac{1}{m_i} y_{i+2} - \frac{k_i}{m_i} y_i. \quad (4.57)$$

Неважко переконатися в тому, що, виключивши y_i з (4.57) за допомогою крайових умов системи (4.50), одержимо це рівняння у виді:

$$y_{i+1} = C_i(d_i - y_{i+2}) \quad (i = 0, 1, 2, \dots, n-2), \quad (4.58)$$

де C_i, d_i – деякі коефіцієнти.

Нехай, наприклад, $i = 0$; тоді (4.57) набуде вигляду:

$$y_1 = \frac{h^2}{m_0} f_0 - \frac{1}{m_0} y_2 - \frac{k_0}{m_0} y_0. \quad (4.59)$$

З крайової умови $\alpha_0 y(a) + \alpha_1 \frac{y_1 - y_0}{h} = A$ знайдемо y_0 :

$$y_0 = \frac{A \cdot h}{\alpha_0 h - \alpha_1} - \frac{\alpha_1}{\alpha_0 h - \alpha_1} y_1$$

і підставимо його в (4.59). Після перетворень одержимо:

$$y_1 = \frac{\alpha_1 - \alpha_0 h}{m_0(\alpha_1 - \alpha_0 h) + k_0 \alpha_1} \left[\left(\frac{k_0 A \cdot h}{\alpha_1 - \alpha_0 h} + h^2 f_0 \right) - y_2 \right].$$

Позначимо:

$$C_0 = \frac{\alpha_1 - \alpha_0 h}{m_0(\alpha_1 - \alpha_0 h) + k_0 \alpha_1}; \quad d_0 = \frac{k_0 A \cdot h}{\alpha_1 - \alpha_0 h} + h^2 f_0. \quad (4.60)$$

З (4.58) можна записати:

$$y_i = C_{i-1}(d_{i-1} - y_{i+1}).$$

Підставивши це вираження в (4.56), одержимо:

$$y_{i+2} + m_i y_{i+1} + k_i C_{i-1}(d_{i-1} - y_{i+1}) = h^2 f_i,$$

звідки:

$$y_{i+1} = [(h^2 f_i - k_i C_{i-1} d_{i-1}) - y_{i+2}] / (m_i - k_i C_{i-1}). \quad (4.61)$$

Порівнюючи (4.58) і (4.61), одержимо для визначення C_i і d_i рекурентні формули:

$$C_i = 1 / (m_i - k_i C_{i-1});$$

$$d_i = h^2 f_i - k_i C_{i-1} d_{i-1}, \quad (4.62)$$

де $i = 1, 2, \dots, n-2$; C_i, d_i – прогоночні коефіцієнти.

Метод прогону складається з двох етапів – прямий і зворотний ходи.

На першому етапі (прямий хід) на підставі (4.60) визначаються коефіцієнти C_0 і d_0 . Потім, послідовно застосовуючи рекурентні формули (4.62), одержують значення C_i і d_i ($i = 1, 2, \dots, n-2$).

Другий етап (зворотний хід) починається з визначення y_n . Використовуючи другу крайову умову (4.49) і формулу (4.58) при $i = n-2$, запишемо систему двох рівнянь:

$$\beta_0 y(b) + \beta_1 \frac{y_n - y_{n-1}}{h} = B;$$

$$y_{n-1} = C_{n-2}(d_{n-2} - y_n). \quad (4.63)$$

Вирішивши цю систему відносно y_n , одержимо:

$$y_n = \frac{\beta_1 \cdot C_{n-2} \cdot d_{n-2} + B \cdot h}{\beta_1(1 + C_{n-2}) + \beta_0 \cdot h}. \quad (4.64)$$

Підставивши в (4.64) уже знайдені прямим ходом C_{n-2}, d_{n-2} , визначаємо y_n . Потім обчислюють $y_{n-1}, y_{n-2}, y_{n-3}, \dots, y_1$, послідовно застосовуючи рекурентну формулу (4.58):

$$y_{n-1} = C_{n-2}(d_{n-2} - y_n); \quad y_{n-2} = C_{n-3}(d_{n-3} - y_{n-1}); \quad \dots; \quad y_1 = C_0(d_0 - y_2). \quad (4.65)$$

Значення y_0 знаходимо за формулою, отриманою з першої крайової умови (4.50):

$$y_0 = \frac{\alpha_1 \cdot y_1 - A \cdot h}{\alpha_1 - \alpha_0 \cdot h}. \quad (4.66)$$

АЛГОРИТМ РІШЕННЯ КРАЙОВОЇ ЗАДАЧІ МЕТОДОМ ПРОГОНУ

1. Вибирається крок h і знаходяться вузлові точки x_i .
2. У вузлових точках визначаються коефіцієнти m_i , k_i і f_i (при необхідності).
3. Визначаються за (4.60) прогоночні коефіцієнти в початковій точці C_0 і d_0 .
4. За (4.62) розраховуються прогоночні коефіцієнти C_i і d_i .
5. За (4.64) визначається значення y_n .
6. Використовуючи формули (4.65) чи (4.58), послідовно обчислюють значення y_{n-1} , y_{n-2} , y_{n-3} , ..., y_1 .
7. Значення y_0 знаходиться за (4.66).
8. Для перевірки точності рішення величина кроку міняється вдвічі, й алгоритм повторюється, починаючи з п.1.
9. Оцінюється точність отриманого рішення шляхом порівняння відповідних значень y_i^* і y_i . Якщо отримана погрішність задовольняє заданій точності, то рішення завершується. У противному випадку обчислення повторюються з ще зменшеним удвічі кроком.

4.4. ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНИХ ОПИСІВ ЕЛЕМЕНТІВ ХТС СТАТИСТИЧНИМИ МЕТОДАМИ

При розробці експериментально–статистичних моделей елементів ХТС не ставиться задача детального опису закономірностей процесів, що відбуваються в об'єктах моделювання. Математичний опис елемента будується у виді регресійних залежностей вихідних параметрів об'єкта від вхідних змінних і являє собою звичайно лінійні чи нелінійні поліноміальні рівняння. Коефіцієнти матриці перетворення, що є одночасно і коефіцієнтами регресії відповідних поліномів, знаходять шляхом реалізації методів планування експерименту на самому об'єкті чи на моделі, що відбиває його фізико–хімічну сутність.

Використання методів планування експерименту на математичній моделі дозволяє істотно скоротити розрахункові процедури і одержати коефіцієнти матриці перетворення елемента ХТС у заданому діапазоні зміни вхідних змінних.

Розглянемо деякі методи планування експерименту, використовувани при побудові математичних описів елементів ХТС.

4.4.1. Побудова лінійних регресійних моделей елементів ХТС на основі планів першого порядку

До планів першого порядку відносяться повний і дробовий факторний експеримент (ПФЕ і ДФЕ).

Лінійні рівняння регресії, одержувані за допомогою ПФЕ чи ДФЕ, мають наступний вид

$$y_i = b_{0i} + b_{1i}X_1 + b_{2i}X_2 + \dots + b_{ni}X_n,$$

де y_i – вихідний параметр (функція відгуку); b_{0i} – вільний член рівняння регресії; $b_{1i}, b_{2i}, \dots, b_{ni}$ – елементи матриці перетворення (коефіцієнти при лінійних членах рівняння регресії); X_1, X_2, \dots, X_n – вхідні перемінні (фактори).

Загальне число дослідів ПФЕ N визначають за формулою: $N=2^n$, де n — число вхідних змінних (факторів).

Перед проведенням дослідів чисельного експерименту на детермінованій моделі елемента ХТС варто скласти план реалізації дослідів, що прийнято називати матрицею планування. Вона може бути складена в розмірних значеннях відповідних рівнів факторів (цей варіант матриці планування необхідний при постановці експериментальних досліджень) чи в безрозмірних кодованих значеннях змінних (цей варіант матриці використовується, головним чином, для розрахунків коефіцієнтів рівняння регресії). Для переходу до кодованих змінних служить формула

$$X_i = (x_i - x_{i0}) / \Delta x_i; \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (4.67)$$

де X_i, x_i – значення фактора в кодованих і розмірних змінних; x_{i0} – значення фактора на базовому рівні; Δx_i — інтервал варіювання за даним фактором.

Вибір інтервалів варіювання і базових рівнів факторів є складною задачею, що визначає в ряді випадків результати досліджень. На практиці звичайно інтервал варіювання приймають у розмірі 20–50% від значення фактора на нульовому (базовому) рівні. Як базовий рівень фактора часто вибирають його значення у відпрацьованому режимі функціонування технологічного процесу.

Матриця ПФЕ для двох факторів з урахуванням парних взаємодій кодованих змінних приведена в **табл. 4.1**. Такий варіант плану називається розширеною матрицею.

Таблиця 4.1

Розширена матриця повного двофакторного експерименту

Номер дослідів	Фактори			Функція відгуку
	X_1	X_2	$X_1 X_2$	
1	–1	–1	+1	Y_1
2	+1	–1	–1	Y_2
3	–1	+1	–1	Y_3
4	+1	+1	+1	Y_4

Основні принципи побудови матриць ПФЕ наступні: рівні варіювання першого фактора чергуються від досліду до досліду; частота зміни рівнів варіювання кожного наступного фактора вдвічі менше, ніж у попереднього.

Матриця планування ПФЕ має наступні властивості:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N X_{ji} &= 0; & \sum_{j=1}^N X_{ji}^2 &= N; \\ \sum_{j=1}^N X_{ji} \cdot X_{jm} &= 0; & j &\neq m, \end{aligned} \quad (4.68)$$

де j і i — номери досліду і фактора.

Властивість, виражена рівнянням (4.68), називається ортогональністю матриці. Вона дозволяє обчислити коефіцієнти регресії за простими формулах незалежно один від одного.

Коефіцієнти регресії за результатами ПФЕ знаходять методом найменших квадратів. Основна умова методу формулюється так: коефіцієнти регресії визначаються на підставі мінімізації суми квадратів відхилень між експериментальними y_j^e і розрахованими за рівнянням регресії значеннями функцій відгуку y_j^p :

$$\sum_{j=1}^N (y_j^e - y_j^p)^2 \rightarrow \min.$$

У загальному випадку формули для розрахунку коефіцієнтів регресії за результатами ПФЕ мають вид:

$$b_0 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_j^e; \quad (4.69)$$

$$b_i = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_{ji} y_j^e; \quad i = 1, 2, 3, \dots, n; \quad (4.70)$$

$$b_{lm} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_{jl} x_{jm} y_j^e; \quad i \neq m. \quad (4.71)$$

Тоді, коли математичний опис елемента ХТС розробляється на основі дослідних даних, отриманих безпосередньо на об'єкті, після розрахунку коефіцієнтів необхідно провести статистичний аналіз отриманого рівняння регресії, першим етапом якого є перевірка значимості коефіцієнтів.

Гіпотезу про значимість коефіцієнтів регресії перевіряють за критерієм Стьюдента. Дисперсію у визначенні коефіцієнтів регресії оцінюють за формулою: $S_b^2 = S_y^2/N$, де S_y^2 – оцінка дисперсії відтворюваності, обумовлена за даними попереднього експерименту

За результатами ПФЕ всі коефіцієнти регресії визначаються з однаковою погрішністю.

Коефіцієнт регресії вважається значимим, якщо виконується умова:

$$|b_i| > S_b t_{\text{таб}}, \quad (4.72)$$

де $S_b = \sqrt{S_Y^2 / N}$ – середньоквадратична помилка у визначенні коефіцієнтів регресії; $t_{\text{таб}}$ – табличне значення критерію Стьюдента при обраному рівні значимості і числі ступенів свободи $f_y = N_n(K_n - 1)$, з яким була визначена оцінка дисперсії відтворюваності вихідного параметра S_y^2 ; N_n – число серій рівнобіжних дослідів, реалізованих для перебування оцінки дисперсії S_y^2 ; K_n – число рівнобіжних дослідів у кожній серії.

У випадку невиконання умови (4.72) коефіцієнт регресії вважається незначущим і прирівнюється до нуля. Однак незначність його може бути викликана також невірним вибором інтервалу варіювання відповідного фактора, тому в ряді випадків доцільно розширити інтервал варіювання по відповідному фактору і провести нові дослідження.

Перевірка адекватності отриманого рівняння регресії експериментальним даним проводиться за допомогою критерію Фішера:

$$F_p = S_{\text{ад}}^2 / S_y^2, \quad (4.73)$$

де $S_{\text{ад}}^2$ – оцінка дисперсії адекватності.

Дисперсію адекватності оцінюють за формулою:

$$S_{\text{ад}}^2 = \frac{1}{N - B} \sum_{j=1}^N (y_j^e - y_j^p)^2, \quad (4.74)$$

де B – число значимих коефіцієнтів рівняння регресії; y_j^e , y_j^p – експериментальне і розрахункове значення функції відгуку в j -му досвіді.

З оцінкою дисперсії адекватності зв'язане число ступенів свободи:

$$f_{\text{ад}} = N - B.$$

Вважається, що рівняння регресії адекватно описує експериментальні дані, якщо виконується умова :

$$F_p \leq F_{\text{таб}},$$

де $F_{\text{таб}}$ – табличне значення критерію Фішера.

Для визначення табличного значення критерію Фішера необхідно знати число ступенів свободи, зв'язаних з чисельником і знаменником вираження (4.73).

Одним з недоліків ПФЕ є те, що зі збільшенням числа факторів, розглянутих дослідником, різко зростає число дослідів ПФЕ. Причому це число значно перевищує число обумовлених коефіцієнтів рівняння регресії.

Ідея ДФЕ складається в скороченні числа дослідів ПФЕ, але при прагненні до збереження матрицею планування властивості ортогональності. Ця ідея реалізується таким чином: деякі зі взаємодій факторів визнаються незначущими в тій чи іншій області факторного простору, що і дозволяє

використовувати відповідний стовпець розширеної матриці планування ПФЕ для оцінки впливу додаткового фактора.

Загальне число дослідів ДФЕ визначається за формулою: $N=2^{n-c}$, де n – загальне число факторів; c – число факторів, прирівняних до добутоків.

Коли при побудові матриць перетворення елементів ХТС за допомогою ПФЕ і ДФЕ вирішується задача апроксимації даних, отриманих шляхом постановки чисельного експерименту на детермінованій моделі об'єкта, статистичний аналіз отриманих рівнянь не роблять, а про якість апроксимації судять за значеннями відносної погрішності в точках плану першого порядку:

$$\varepsilon = (y_i^e - y_i^p) / y_i^e \cdot 100\%.$$

Побудова матриці перетворення за допомогою ПФЕ розглянемо на прикладі протivotочного кожухотрубчастого теплообмінника (рис. 4.9).

Детермінована модель теплообмінника даного типу може бути записана у виді:

$$t_{г.к} = t_{г.п} - (t_{г.п} - t_{х.п}) \cdot r$$

$$t_{х.к} = t_{х.п} + (t_{г.п} - t_{х.п}) \cdot r \cdot n$$

$$n = g_r C_r / (g_x C_x); m = k_r F / (g_r C_r);$$

$$r = \frac{e^{m \cdot (1-n)} - 1}{e^{m \cdot (1-n)} - n}. \quad (4.75)$$

Тут $t_{г.п}$ і $t_{г.к}$ – початкова і кінцева температури гарячого теплоносія;

$t_{х.п}$ і $t_{х.к}$ – початкова і кінцева температури холодного теплоносія;

F – поверхня теплопередачі;

g_r і C_r – витрата і теплоємність теплоносія, що віддає тепло (гарячого теплоносія);

g_x і C_x – витрата і теплоємність теплоносія, що сприймає тепло (холодного теплоносія); k – коефіцієнт теплопередачі.

Як впливаючі фактори (вхідні змінні) були обрані:

x_1 (g_x) – масова витрата холодного теплоносія, кг/год.;

x_2 (g_r) – масова витрата гарячого теплоносія (реакційної суміші), кг/год.;

x_3 ($t_{х.п}$) – початкова температура холодного теплоносія, °С;

x_4 ($t_{г.п}$) – початкова температура гарячого теплоносія, °С.

Базові рівні й інтервали варіювання факторів приведені в *табл. 4.2*.

Як функції відгуку (вихідні параметри) були обрані:

y_1 ($t_{х.к}$) – кінцева температура холодного теплоносія, °С;

y_2 ($t_{г.к}$) – кінцева температура гарячого теплоносія, °С.

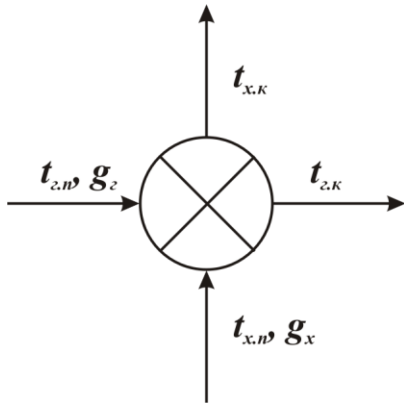


Рис. 4.9. Схема теплообмінника

Таблиця. 4.2

Умови проведення чисельних експериментів на детермінованій моделі теплообмінника за допомогою ЕОМ

Найменування	X_1	X_2	X_3	X_4
Базовий рівень	16500	22500	147,5	610
Інтервал варіювання	1500	2500	12,5	40
Нижній рівень	15000	20000	135	570
Верхній рівень	18000	25000	160	650

Для побудови матриці перетворення теплообмінника використовували ПФЕ типу 2^4 . Матриця планування в кодованій формі і результати її реалізації на детермінованій моделі теплообмінника приведені в **табл. 4.3**.

Таблиця 4.3

Матриця планування і результати її реалізації на детермінованій моделі теплообмінника

Номер досліджу	Фактори								Функція відгуку	
	у розмірних значеннях				у кодованих значеннях					
	X_1	X_2	X_3	X_4	X_1	X_2	X_3	X_4	y_1	y_2
1	15000	20000	135	570	-1	-1	-1	-1	504	416
2	18000	20000	135	570	+1	-1	-1	-1	476	399
3	15000	25000	135	570	-1	+1	-1	-1	510	445
4	18000	25000	135	570	+1	+1	-1	-1	485	430
5	15000	20000	160	570	-1	-1	+1	-1	508	425
6	18000	20000	160	570	+1	-1	+1	-1	482	409
7	15000	25000	160	570	-1	+1	+1	-1	514	452
8	18000	25000	160	570	+1	+1	+1	-1	490	438
9	15000	20000	135	650	-1	-1	-1	+1	572	468
10	18000	20000	135	650	+1	-1	-1	+1	539	448
11	15000	25000	135	650	-1	+1	-1	+1	680	501
12	18000	25000	135	650	+1	+1	-1	+1	549	484
13	15000	20000	160	650	-1	-1	+1	+1	576	477
14	18000	20000	160	650	+1	-1	+1	+1	544	458
15	15000	25000	160	650	-1	+1	+1	+1	583	509
16	18000	25000	160	650	+1	+1	+1	+1	554	492

За формулами (4.69–4.71) розраховуємо коефіцієнти регресії. Наприклад, для залежності $t_{x, k}$ від факторів, що впливають:

$$Y_1(t_{x, k}) = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + b_4X_4.$$

Вільний член дорівнює:

$$b_0 = 1/16(504 + 476 + 510 + 485 + 508 + 482 + 514 + 490 + 572 + 539 + 580 + 549 + 576 + 544 + 583 + 554) = 529,1.$$

Визначимо коефіцієнти при лінійних членах:

$\mathbf{b}_1 = 1/16 (-504 + 476 - 510 + 485 - 508 + 482 - 514 + 490 - 572 + 539 - 580 + 549 - 576 + 544 - 583 + 554) = -14,25$; $\mathbf{b}_2 = 4,0$; $\mathbf{b}_3 = 2,25$; $\mathbf{b}_4 = 33,0$.

За співвідношенням (4.67) перетворимо рівняння на розмірну форму:

$$\mathbf{X}_1 = (x_1 - 16500)/1500; \quad \mathbf{X}_2 = (x_2 - 22500)/2500;$$

$$\mathbf{X}_3 = (x_3 - 147,5)/12,5; \quad \mathbf{X}_4 = (x_4 - 610)/40.$$

Після перетворення одержимо:

$$y_1 = 120,05 - 0,0095x_1 + 0,0016x_2 + 0,18x_3 + 0,828x_4.$$

Зробивши аналогічні розрахунки, для $\mathbf{Y}_2(\mathbf{t}_{x,k})$ маємо наступне рівняння регресії:

$$y_2 = -49,2173 - 0,005625x_1 + 0,006275x_2 + 0,345x_3 + 0,66093x_4.$$

Таким чином, математична модель теплообмінника може бути записана в матричному виді:

$$\begin{bmatrix} t_{x,k} \\ t_{r,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} g_x \\ t_{x,n} \\ g_r \\ t_{r,n} \\ 1 \end{bmatrix},$$

де $a_{11} = -0,0095$; $a_{21} = -0,005625$; $a_{12} = 0,0016$; $a_{22} = 0,006275$; $a_{13} = 0,18$; $a_{23} = 0,345$; $a_{14} = 0,828$; $a_{24} = 0,66093$; $a_{15} = 120,05$; $a_{25} = -49,2173$.

4.4.2. Розробка нелінійних регресійних моделей

Побудова моделей на основі даних активного експерименту. Тоді, коли залежності між вихідними і вхідними параметрами елемента ХТС носять явний *нелінійний характер*, для одержання коефіцієнтів матриці перетворення не можуть бути використані плани першого порядку. Для одержання математичного опису об'єкта в цьому випадку часто використовують так звані композиційні плани другого порядку, наприклад, ортогональний центральний композиційний план (ОЦКП). Опис елемента ХТС одержують у виді поліноміального рівняння другого порядку:

$$y = b_0 + \sum_{i=1}^n b_i \cdot X_i + \sum_{i < j} b_{ij} \cdot X_i \cdot X_j + \sum_{i=1}^n b_{ii} \cdot X_i^2. \quad (4.76)$$

Для визначення коефіцієнтів цього полінома необхідно провести експеримент, у якому *кожен фактор варіювався б не менш ніж на трьох рівнях*.

Структура плану другого порядку, призначеного для перебування коефіцієнтів квадратичної моделі (4.76), має істотне значення. Справа в тому, що дослідник звертається до планів другого порядку звичайно після того, як йому не вдалося одержати адекватну модель в результаті реалізації ПФЕ чи ДФЕ, тобто плану першого порядку. При цьому, природно, виникає бажання

зберегти і надалі використовувати результати експерименту, виконаного на попередньому етапі досліджень.

З урахуванням цих розумінь розроблені так звані композиційні плани другого порядку. **Структура цих планів являє собою композицію з плану першого порядку і деякого числа додаткових дослідів.** При цьому один чи кілька дослідів проводяться в центрі плану. Завдяки своїй структурі, такі плани експериментів називаються центральними композиційними (ЦКП).

На **рис. 4.10** показано розташування дослідів центральних композиційних планів для двох і трьох факторів.

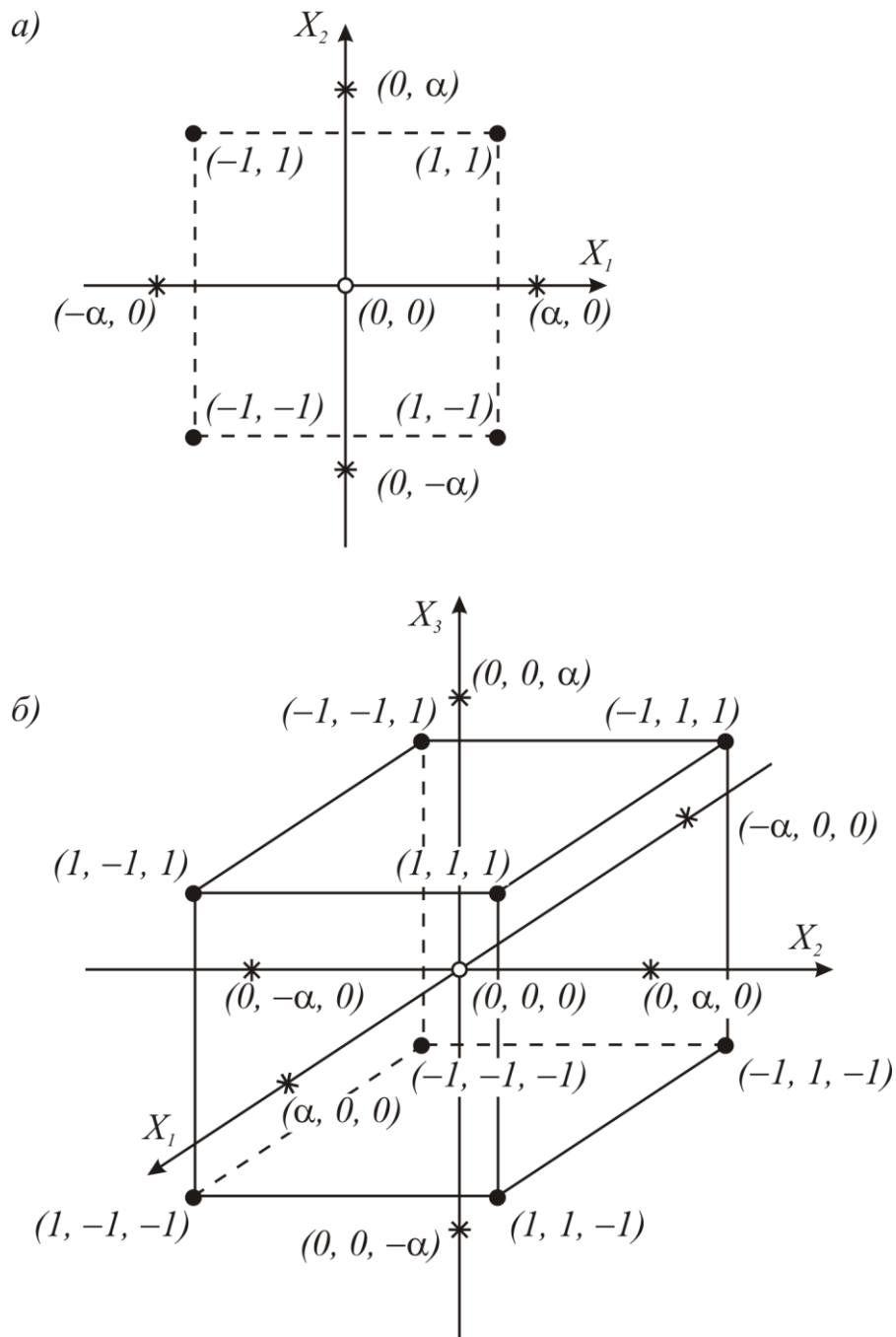


Рис. 4.10. Система дослідів дво- (а) і трьохфакторного (б) композиційних планів другого порядку

Світла точка позначає центр плану, почорнена – його ядро. Ядром плану служать ПФЕ чи ДФЕ. На координатних осях на відстані α від центра плану позначені символом * досліди в так званих «зоряних» точках. Відстань α називається «зоряним плечем». Біля кожного досліду зазначені в дужках значення кодованих перемінних. Відповідні матриці планування приведені в *табл. 4.4 і 4.5.*

Таблиця 4.4

Матриці двофакторного композиційного плану другого порядку

№ n/n	Фрагмент плану	X_1	X_2	X_3	Y
1	Ядро	+1	+1	+1	y_1
2		-1	+1	-1	y_2
3		+1	-1	-1	y_3
4		-1	-1	+1	y_4
5	Зоряні точки	+ α	0	0	y_5
6		- α	0	0	y_6
7		0	+ α	0	y_7
8		0	- α	0	y_8
9	Центр	0	0	0	y_9

Таблиця 4.5

Матриця трьохфакторного композиційного плану другого порядку

№ n/n	Фрагмент плану	X_1	X_2	X_3	Y
1	Ядро	+1	+1	+1	y_1
2		-1	+1	+1	y_2
3		+1	-1	+1	y_3
4		-1	-1	+1	y_4
5		+1	+1	-1	y_5
6		-1	+1	-1	y_6
7		+1	-1	-1	y_7
8		-1	-1	-1	y_8
9	Зоряні точки	+ α	0	0	y_9
10		- α	0	0	y_{10}
11		0	+ α	0	y_{11}
12		0	- α	0	y_{12}
13		0	0	+ α	y_{13}
14		0	0	- α	y_{14}
15	Центр	0	0	0	y_{15}

Якщо число факторів більше чотирьох, то як ядро плану доцільно використовувати ДФЕ. Загальне число досвідів ЦКП розраховують за формулою

$$N_{\text{цкп}} = N_{\text{я}} + N_{\text{зв}} + N_0,$$

де $N_{\text{я}}$ – число дослідів у ядрі плану; $N_{\text{зв}}$ – число дослідів у зоряних точках; N_0 – число центральних дослідів. Очевидно, що $N_{\text{зв}} = 2n$, тобто вдвічі перевищує число факторів.

Зі структури ЦКП випливає, що кожен фактор варіюється на п'ятьох рівнях:

$$- \alpha, -1, 0, +1, +\alpha.$$

Таким чином, якщо за допомогою ПФЕ чи ДФЕ неможливо одержати адекватний математичний опис поверхні відгуку, варто перейти до ЦКП другого порядку, додавши досліди в зоряних точках і в центрі плану.

4.4.3. Побудова моделей на основі ОЦКП

Назва цього виду планування обумовлена властивістю ортогональності його матриці. Ця властивість записується таким чином:

$$\sum_{j=1}^N X_{jl} \cdot X_{jm} = 0; \quad l \neq m; \quad l, m = 1, 2, \dots, n.$$

Іншими словами, *сума парних добутків елементів двох будь-яких стовпців матриці планування дорівнює нулю*. На підставі зазначеної властивості *оцінки коефіцієнтів регресії розраховуються незалежно одна від одної* і мається можливість виключити з розгляду ті фактори, при яких коефіцієнти виявляються незначущими.

Випливає однак відмінність, що властивість ортогональності не виконується для стовпців, що містять квадрати значень факторів, тобто:

$$\sum_{j=1}^N X_{jl}^2 \cdot X_{jm}^2 \neq 0.$$

Наприклад, для ОЦКП із двома факторами (див. *табл. 4.4*) маємо:

$$\sum_{j=1}^9 X_{jl}^2 \cdot X_{jm}^2 = 4.$$

Для забезпечення ортогональності всіх стовпців матриці планування замість квадратів значень факторів вводять нові змінні:

$$X_{ji}^* = X_{ji}^2 - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_{ji}^2; \quad i = 1, 2, \dots, n; \quad j = 1, 2, \dots, N,$$

де N – загальне число дослідів; n – число вхідних перемінних (факторів).

З умови ортогональності $\sum_{j=1}^N X_{jl}^* \cdot X_{jm}^* = 0$ отримане рівняння для зоряного плеча α :

$$4\alpha^4 + 4\alpha^2 N_{\text{я}} - N_{\text{я}} (N_{\text{зв}} + N_0) = 0.$$

Рішення цього рівняння має вид:

$$\alpha = \{[N_{\text{я}}^2 + N_{\text{я}}(N_{\text{зв}} + 1) - N_{\text{я}}]^{0,5} / 2\}^{0,5}.$$

В ОЦКП другого порядку не накладається ніяких обмежень на число дослідів у центрі плану N_0 . Звичайно приймають $N_0 = 1$.

У *табл. 4.6* приведені основні характеристики ОЦКП, а в *табл. 4.7* представлена матриця ОЦКП для двох факторів.

Таблиця 4.6

Основні характеристики ОЦКП

n	$N_{\text{я}}$	$N_{\text{зв}}$	N_0	N	α
2	2^2	4	1	9	1,000
3	2^2	6	1	15	1,215
4	2^4	8	1	25	1,414
5	2^{5-1}	10	1	27	1,547

Таблиця 4.7

Матриця ОЦКП для двох факторів

№ n/n	Фрагмент плану	X_1	X_2	X_1X_2	$X_1^* =$ $X_1^2 - 2/3$	$X_2^* =$ $X_2^2 - 2/3$	y
1	Ядро	+1	+1	+1	+0,33	+0,33	y_1
2		-1	+1	-1	+0,33	+0,33	y_2
3		+1	-1	-1	+0,33	+0,33	y_3
4		-1	-1	+1	+0,33	+0,33	y_4
5	Зоряні точки	+1	0	0	+0,33	-0,67	y_5
6		-1	0	0	+0,33	-0,67	y_6
7		0	+1	0	-0,67	+0,33	y_7
8		0	-1	0	-0,67	+0,33	y_8
9	Центр	0	0	0	-0,67	-0,67	y_9

При побудові матриці ОЦКП використані допоміжні змінні X_1^* і X_2^* :

$$X_1^* = X_1^2 - \frac{1}{9} \sum_{j=1}^9 X_{j1}^2 = X_1^2 - 2/3;$$

$$X_2^* = X_2^2 - \frac{1}{9} \sum_{j=1}^9 X_{j2}^2 = X_2^2 - 2/3.$$

За допомогою ОЦКП шукають коефіцієнти рівняння регресії наступного виду:

$$y = b_0^* + \sum_{i=1}^n b_i \cdot X_i + \sum_{i < j} b_{ij} \cdot X_i \cdot X_j + \sum_{i=1}^n b_{ii} (X_i^2 - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N X_{ji}^2) \quad (4.77)$$

чи

$$y = b_0^* + \sum_{i=1}^n b_i \cdot X_i + \sum_{i < j} b_{ij} \cdot X_i \cdot X_j + \sum_{i=1}^n b_{ii} X_i^* . \quad (4.78)$$

У силу ортогональності матриці ОЦКП усі коефіцієнти регресії визначаються незалежно один від одного

$$b_0^* = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \overline{y_j},$$

де $\overline{y_j}$ – середнє арифметичне значення рівнобіжних дослідів; якщо досліди не дублюються, то замість $\overline{y_j}$ використовують результати одиночних дослідів y_j :

$$b_i = \sum_{j=1}^N X_{ji} y_j / \sum_{j=1}^N X_{ji}^2 \quad (4.79)$$

$$b_{lm} = \sum_{j=1}^N X_{jl} X_{jm} y_j / \sum_{j=1}^N (X_{jl} X_{jm})^2 \quad l \neq m \quad (4.80)$$

$$b_{ii} = \sum_{j=1}^N X_{ji}^* y_j / \sum_{j=1}^N (X_{ji}^*)^2 . \quad (4.81)$$

Наприклад, застосовуючи формулу (4.79) до даних *табл. 4.7*, одержимо:

$$b_1 = \frac{1}{6} (y_1 - y_2 + y_3 - y_4 + y_5 - y_6);$$

$$b_{11} = \left\{ \frac{1}{3} (y_1 + y_2 + y_3 + y_4 + y_5 + y_6) \right\} / 2 - \left\{ \frac{2}{3} (y_7 + y_8 + y_9) \right\} / 2 .$$

Для переходу від рівняння регресії виду (4.78) до звичайної форми запису (4.76) знаходять коефіцієнт:

$$b_0 = b_0^* - \frac{b_{11}}{N} \sum_{j=1}^N X_{j1}^2 - \dots - \frac{b_{nn}}{N} \sum_{j=1}^N X_{jn}^2 .$$

Помітимо при цьому, що:

$$\sum_{j=1}^N X_{j1}^2 = \dots = \sum_{j=1}^N X_{jn}^2 ;$$

тому:

$$b_0 = b_0^* - \frac{1}{N} \left(\sum_{j=1}^N X_{j1}^2 \right) \left(\sum_{i=1}^n b_{ii} \right) .$$

При проведенні ОЦКП досліди або не дублюються, тобто кожен дослід проводиться однократно, або дублюються однакове число раз. Дисперсію відтворюваності оцінюють за звичайними правилами.

При однаковому числі повторних дослідів знаходять порядкові середні значення функції відгуку y_j і відповідні оцінки дисперсій S_j^2 . Якщо S_j^2 однорідні, то оцінку дисперсії відтворюваності розраховують за формулою:

$$S_y^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N S_j^2. \quad (4.82)$$

Для розрахунку оцінок дисперсій у визначенні коефіцієнтів регресії користуються наступними формулами:

$$S_{b_0}^2 = S_y^2 / k \cdot N; \quad S_{b_i}^2 = S_y^2 / k \sum_{j=1}^N X_{ji}^2;$$

$$S_{b_{lm}}^2 = S_y^2 / k \cdot \sum_{j=1}^N (X_{jl} \cdot X_{jm})^2; \quad l \neq m;$$

$$S_{b_{ii}}^2 = S_y^2 / k \cdot \sum_{j=1}^N (X_{ji}^*)^2; \quad S_{b_0}^2 = S_{b_0}^{*2} + \frac{n \cdot S_{b_{ii}}^2}{N} \sum_{j=1}^N X_{ji}^2. \quad (4.83)$$

Тут k – число рівнобіжних дослідів, проведених за однакових умов. Якщо досліди не дублюються, то $k = 1$.

Гіпотезу про значимість коефіцієнтів регресії перевіряють за допомогою критерію Стюдента. Будь-який коефіцієнт регресії b_i вважається значимим, якщо виконується умова $|b_i| > S_{b_i} t_{\text{таб}}$, де $S_{b_i}^2$ — оцінка дисперсії, з якою визначається коефіцієнт регресії; S_{b_i} – середньоквадратична помилка; $t_{\text{таб}}$ – табличне значення критерію Стюдента.

Іноді діють інакше: знаходять t_i – відношення для кожного коефіцієнта регресії $t_i = |b_i|/S_{b_i}$ і порівнюють його з табличним значенням критерію Стюдента $t_{\text{таб}}$. Коефіцієнт регресії вважається значимим, якщо виконується умова: $t_i > t_{\text{таб}}$. Незначущі коефіцієнти виключаються з рівняння.

Адекватність рівняння регресії перевіряють за допомогою критерію Фішера.

4.4.4. Побудова мультиплікативних регресійних моделей на основі даних пасивного експерименту

У багатьох випадках нелінійну регресійну залежність представляють у виді добутку деяких функцій, кожна з яких є функцією тільки однієї незалежної змінної:

$$Y = k \cdot f_1(x_1) \cdot f_2(x_2) \cdot \dots \cdot f_n(x_n), \quad (4.84)$$

де коефіцієнт k – деяка константа.

Такі регресійні моделі прийнято називати мультиплікативними. Функції $f_i(x_i)$ можуть бути різними; на практиці найчастіше використовують лінійну, параболічну і поліноміальну функції.

Метод знаходження параметрів мультиплікативних моделей був запропонований Брандоном. Алгоритм цього методу полягає в наступному.

1. Обчислюють середнє значення всіх m реалізацій величини y :

$$\bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m y_j.$$

2. Нормують результати вимірів щодо середнього значення:

$$Y_j = y_j / \bar{y},$$

де j – порядковий номер досліду.

3. Вибирають вид залежності Y від x_1 і методом найменших квадратів визначають параметри формули:

$$\varphi_0 = f_1(x_1).$$

4. Обчислюють значення функції $f_1(x_1)$ і визначають величину (залишковий показник) $\varphi_1 = Y/f_1(x_1)$ для кожного досліду. Передбачається, що φ_1 залежить від змінних x_2, x_3, \dots, x_n , але не залежить від x_1 .

5. Обирають вид залежності φ_1 від x_2 і методом найменших квадратів визначають параметри відповідної формули.

6. Розраховують значення функції $\varphi_2 = \varphi_1/f_2(x_2)$ для кожного досліду. Передбачається, що φ_2 залежить від перемінних x_3, x_4, \dots, x_n , але не залежить від x_1 і x_2 .

Аналогічно визначають параметри всіх інших функцій $f_i(x_i)$ і потім обчислюють значення константи k .

При використанні методу Брандона істотне значення має порядок перебування функцій $f_i(x_i)$. Чим сильніший вплив x_i на y , тим меншим повинний бути номер i . Для оцінки відносної інтенсивності впливу факторів x_i на величину y можуть бути використані різні методи ранжирування.

4.5. ПРИКЛАДИ ЗАДАЧ

4.5.1. Розрахунок та оптимізація трубчастого реактора окислення метанолу

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Провести розрахунки полів концентрацій компонентів і температури в реакторі окислювання метанолу у формальдегід та на підставі аналізу отриманих результатів визначити технологічні параметри роботи і знайти оптимальний ступінь перетворення у зазначеному в завданні інтервалі

можливих значень цього параметра, що забезпечує максимальне значення виходу формальдегіду.

ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

У трубчастому каталітичному реакторі каталізатор розташований в трубках. Через стінки трубок здійснюється відведення (для екзотермічних процесів) або підведення (для ендотермічних процесів) тепла за допомогою зовнішнього теплоносія, що подається в міжтрубний простір. Схема такого реактора приведена на *рис. 4.11а*, а графік зміни температури в шарі каталізатора – на *рис. 4.11б*.

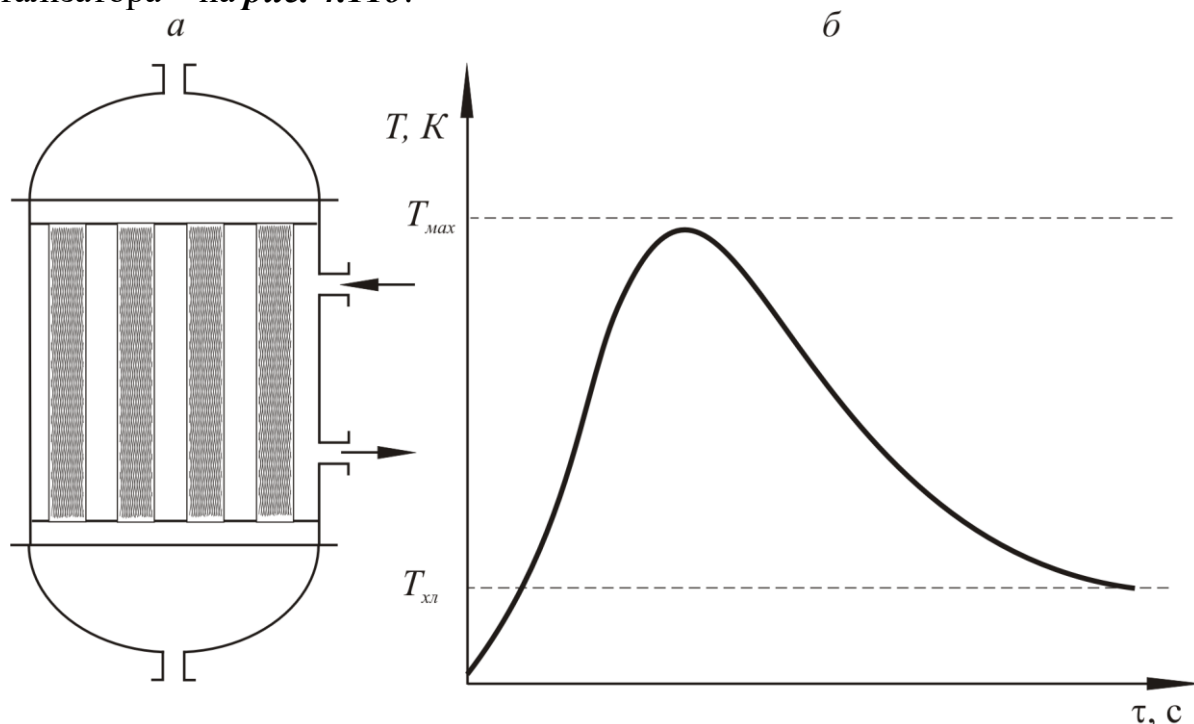


Рис. 4.11. Моделювання процесу окислення метанолу в формальдегід в трубчастому реакторі: а – схема реактора, б – залежність зміни температури від часу контакту

При розрахунку параметрів процесу в трубчастому реакторі використовується двохпараметрична дифузійна математична модель (4.38–4.40). Для процесу окислення метанолу і формальдегіду, в якому протікають дві послідовні безповоротні реакції:



Математична модель має вигляд:

$$\text{Dr} \left(\frac{\partial^2 C_M}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_M}{\partial r} \right) - \omega \frac{\partial C_M}{\partial l} - W_1 = 0 \quad (4.85)$$

$$\text{Dr} \left(\frac{\partial^2 C_\Phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_\Phi}{\partial r} \right) - \omega \frac{\partial C_\Phi}{\partial l} + W_1 - W_2 = 0 \quad (4.86)$$

$$D_r \left(\frac{\partial^2 C_B}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_B}{\partial r} \right) - \omega \frac{\partial C_B}{\partial \ell} + W_1 + W_2 = 0 \quad (4.87)$$

$$D_r \left(\frac{\partial^2 C_K}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_K}{\partial r} \right) - \omega \frac{\partial C_K}{\partial \ell} - \frac{1}{2} (W_1 - W_2) = 0 \quad (4.88)$$

$$\lambda_r \left(\frac{\partial^2 C_T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_T}{\partial r} \right) - \omega C_p \rho \frac{\partial C_T}{\partial \ell} + q_1 W_1 - q_2 W_2 = 0 \quad (4.89)$$

$$W_1 = \frac{K_1 C_M}{1 + a_1 C_M + a_2 C_B + a_3 \frac{C_M}{C_K}} \quad (4.90)$$

$$W_2 = \frac{K_2 C_\phi}{1 + b_1 C_M + b_2 C_B + b_3 \frac{C_\phi}{C_K}} + \frac{K_3 C_M}{1 + b_4 C_B + b_5 \frac{C_M}{C_K}}. \quad (4.91)$$

Граничні умови:

$$r = 0: \quad \frac{\partial C_M}{\partial r} = \frac{\partial C_\phi}{\partial r} = \frac{\partial C_B}{\partial r} = \frac{\partial C_K}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0 \quad (4.92)$$

$$r = R: \quad \frac{\partial C_M}{\partial r} = \frac{\partial C_\phi}{\partial r} = \frac{\partial C_B}{\partial r} = \frac{\partial C_K}{\partial r} = 0 \quad (4.93)$$

$$\lambda_r \frac{\partial T}{\partial r} = K_T \cdot (T_x - T). \quad (4.94)$$

Початкові умови:

$$t = 0: \quad C_M = C_{MВХ}; C_\phi = C_{\phiВХ}; C_B = C_{BВХ}; C_K = C_{KВХ}; T = T_{ВХ}, \quad (4.95)$$

де W_1, W_2 – швидкості основної і побічної реакцій на зерні каталізатора, моль/(м³·с);

C_M, C_ϕ, C_B, C_K – концентрація метанолу, формальдегіду, води, моль/м³;

D_r, λ_r – ефективні коефіцієнти радіальної дифузії (м²/с) і радіальної теплопровідності (Вт/(м·К)) відповідно;

T, T_x – температура газу і холодоагенту, К;

ω – лінійна швидкість реакційної суміші, м/с;

ℓ – поточна координата шару каталізатора в трубці, м;

r, R – поточний і внутрішній радіус трубки, м;

C_p – середня теплоємність реакційної суміші, кДж/(кг·К);

ρ – середня густина реакційної суміші, кг/м³;

q_i – теплові ефекти реакцій, кДж/моль;

K_T – коефіцієнт теплопередачі від реакційної суміші до холодоагенту, Вт/(м²·К).

Перенос речовини та теплоти в подовжньому напрямку за рахунок дифузійного потоку в даному випадку можливо не враховувати, тому що внесок за рахунок конвективного потоку набагато більший.

ОПИС ПРОГРАМИ

Розрахунок процесів, що протікають в трубчастому реакторі, проводиться з використанням програми «Трубчастий реактор», що входить до складу програмного комплексу «COMPLEX». Система рівнянь (4.85–4.95) вирішується методом прогонки. Блок-схема і лістинг програми «COMPLEX. ТРУБЧАСТИЙ РЕАКТОР» приведені у додатках 6, 7.

У програмі «ТРУБЧАСТИЙ РЕАКТОР» порядок уведення вхідних даних наступний:

- два значення температури холодоагенту для одночасного виконання двох розрахунків, °C;
- концентрації метанолу, формальдегіду, води і кисню, моль/м³;
- температура суміші на вході в реактор, °C;
- діаметр зерна каталізатора, м;
- радіус трубки, м;
- довжина трубки, м;
- пористість шару, частки;
- швидкість газу, м/с.

Результати розрахунків виводяться у виді таблиць зміни за довжиною реактора наступних параметрів:

- перепад тиску, МПа;
- довжина шару, м;
- концентрації метанолу, формальдегіду, пари води і кисню, моль/м³;
- середня температура по радіусу трубки, °C;
- ступінь перетворення і селективність, частки;
- час контакту, с.

В окремому рядку виводяться значення температури холодоагенту і максимальної температури в трубці (температура «гарячої точки»).

Початкові дані записуються у виділені вікна панелі, а при переході до розрахунку нового варіанта необхідно виправити значення тільки тих величин, які змінюються. Результати розрахунку двох варіантів з різними значеннями температури холодоагенту виводяться на екран дисплея. Можливий запис результатів на диск, але для цього необхідно вказати ім'я файлу.

Отримані результати розрахунку на ЕОМ шару каталізатора в трубках дозволяють однозначно визначати основні технологічні параметри трубчастого реактора за заданими параметрами процесу – довжину трубок і час контакту в трубчастій частині, швидкість реакційної суміші в трубках з каталізатором, середню температуру зовнішнього теплоносія, що подається в міжтрубний простір для відведення тепла реакції, з заданим інтервалом по довжині 0,05 м, склад і температуру реакційної суміші та безрозмірні характеристики хімічного процесу: ступінь перетворення, селективність і вихід цільового продукту. Ці дані використовуються на подальших етапах проектування технологічної схеми і самого реактора.

МЕТОДИКА РОЗРАХУНКІВ

На показники роботи трубчастого реактора помітно впливають багато які його параметри. Тому для вибору всіх параметрів, що впливають на показники хімічного процесу, необхідно виконати велике число розрахунків на ЕОМ. У даній роботі рекомендується обмежитися в якості керуючих параметрів найбільш істотними – середньою температурою зовнішнього теплоносія в міжтрубному просторі, температурою на вході в каталізатор і швидкістю газової суміші в трубках. Інші параметри, що використовуються при розрахунку (температура суміші на вході в каталізатор $T_{вх}$, внутрішній діаметр трубки $d_{тр}$, ефективний діаметр зерна каталізатора $d_з$, склад суміші на вході, тобто початкові концентрації компонентів $C_{ію}$), слід вибрати з завдання з врахуванням відомих рекомендацій і змінювати їх тільки при необхідності. Довжина трубок задається орієнтовно і остаточно вибирається в ході аналізу результатів розрахунків.

Пристаючи до розрахунку, потрібно перевірити, щоб обрані діаметри трубки і зерна каталізатора задовольняли умові, при якій поле швидкостей у трубці буде достатньо однорідним:

$$4 \leq d_{тр} / d_з \leq 6. \quad (4.96)$$

Спочатку краще вибирати параметри за температурою «гарячої точки» – максимальною температурою в трубці для екзотермічних процесів $T_{г.т.}$, що повинна бути близькою до максимально допустимої за умов роботи каталізатора $T_{макс}^{доп}$. Для скорочення числа розрахунків при виборі температури теплоносія доцільно зробити так.

Виконують два розрахунки при крайніх значеннях із заданого діапазону. За отриманими парами $T_{хл}$ – $T_{г.т.}$ інтерполяцією знаходять значення $T_{хл}$, при якому максимальна $T_{г.т.}$ приблизно дорівнює $T_{макс}^{доп}$, і використовують цю температуру теплоносія для наступного наближення. Два-три наближення дозволяють достатньо точно вибрати температуру теплоносія. На температуру $T_{г.т.}$ в значно меншому ступені також впливає температура суміші на вході в каталізатор.

Після вибору температури теплоносія визначають час контакту, що забезпечує необхідні значення параметрів на виході з реактора. У випадках, коли при потрібному ступені перетворення гідравлічний опір ΔP не відповідає заданому $\Delta P_з$, обирають іншу лінійну швидкість реакційної суміші і всі серії розрахунків, починаючи з вибору температури теплоносія, повторюють. Тому варто звертати особливу увагу на гідравлічний опір реактора, що відповідає заданим ступеням перетворення, починаючи з перших розрахунків, і змінювати швидкість і температуру теплоносія одночасно. Слід враховувати, що підвищення швидкості покращує тепловідвід і веде до зменшення $T_{г.т.}$, тому

треба одночасно підвищити і температуру теплоносія. Навпаки, при зменшенні швидкості суміші треба понизити і $T_{\text{хл}}$.

В остаточно обраному варіанті максимальна температура в трубці повинна бути близькою до припустимої, гідравлічний опір реактора не більше заданого, а час контакту і, відповідно, довжина трубки, при яких досягається потрібний ступінь перетворення, по можливості меншими.

При розрахунку трубчастого реактора обов'язково треба визначити оптимальний ступінь перетворення у зазначеному в завданні інтервалі можливих значень цього параметра, тобто вирішити задачу оптимізації реактора.

Постановка задач оптимізації включає наступні питання:

- вибір критерію оптимальності (Y), що відповідає прийнятним вимогам і що дозволяє вирішити поставлену задачу;
- складання цільової функції, що зв'язує обраний критерій оптимальності з параметрами об'єкта оптимізації

$$Y = F(X, U), \quad (4.97)$$

де X – вектор вхідних параметрів, U – вектор керуючих параметрів об'єкта оптимізації. Оптимізаційні задачі вирішують, як правило, при багатьох обмеженнях вхідних і керуючих параметрів;

- вибір зручного, надійного, точного і доступного методу оптимізації, що дозволяє знайти оптимальне значення деяких керуючих параметрів, які визначаються оптимізованими і при яких Y набуває максимального чи мінімального значення при виконанні усіх додаткових умов і заданих обмеженнях.

Критерій оптимальності і оптимізовані параметри повинні відповідати відомим вимогам. Цільову функцію доцільно спростити, це спростить і алгоритм подальшого рішення задачі. Наприклад, простий метод багатоваріантних розрахунків і вибору оптимальної точки по екстремальному значенню критерію оптимальності можна використовувати, якщо в цільовій функції залишається один змінюваний оптимізований параметр.

Оптимізація реактора окислювання метанолу, як і інших хімічних реакторів, може бути виконана за одним з економічних чи технологічних критеріїв оптимальності. Повну оцінку ефективності реактора в цілому дають економічні критерії, такі як собівартість, виробничі витрати, приведені витрати й інші, які можна визначити в ході економічних розрахунків. Технологічні критерії (вихід продукту, селективність та ін.) не вимагають спеціальних розрахунків, але відбивають лише окремі сторони хімічного процесу в реакторі.

Для оптимізації реактора окислювання метанолу рекомендується вибрати найважливіший технологічний параметр – вихід цільового продукту формальдегіду.

Вихід легко розраховується за формулою

$$B = X \cdot Sel, \quad (4.98)$$

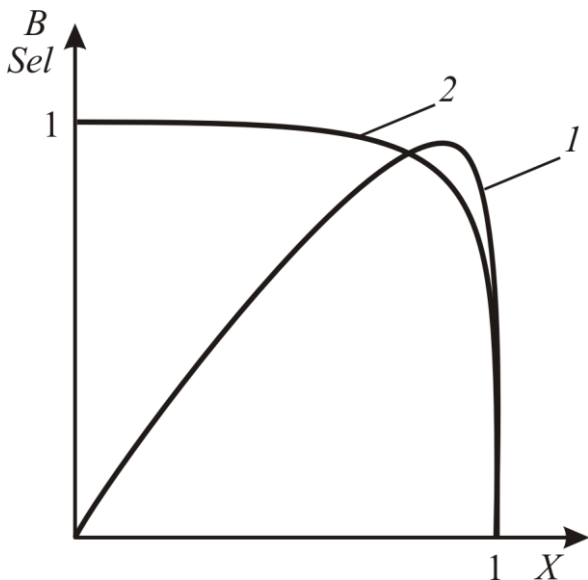


Рис. 4.12. Залежність між виходом проміжного продукту (формальдегіду) і ступенем перетворення вихідної речовини (метанолу) (1), селективністю і ступенем перетворення (2)

де X – ступінь перетворення на виході реактора;

Sel – селективність на виході реактора.

З теорії хімічного процесу, що складається з послідовних реакцій окислювання метанолу і формальдегіду, відомо, що між виходом формальдегіду і ступенем перетворення метанолу існує екстремальна залежність, а селективність також залежить від ступеня перетворення (рис. 4.12), але без екстремуму.

Максимальне значення виходу може досягатися тільки при високих значеннях ступеня перетворення 0,995–0,999, тому в трубчастих реакторах, що працюють в інтервалі 0,965–0,980 максимум виходу не завжди досягається.

При виконанні роботи селективність при конкретному значенні ступеня перетворення визначають з результатів розрахунків реактора за допомогою програми «Трубчастий реактор» для заданого ступеня перетворення, тобто

$$Sel = f(P_{вх}, X), \quad (4.99)$$

де $P_{вх}$ – вхідні параметри програми того чи іншого розрахунку.

Ця залежність існує як математична модель трубчастого каталітичного реактора, що є системою диференціальних рівнянь.

У такому випадку цільову функцію не можна скласти у вигляді рівняння на підставі (4.99), але її можна розглядати у загальному вигляді

$$B = F(P_{вх}, X), \quad (4.100)$$

Функція є багатопараметричною, і це значно ускладнює рішення оптимізаційної задачі, але якщо її виконувати з незмінними вхідними параметрами, змінюючи тільки один – ступінь перетворення, можна використати для оптимізації простий метод багатоваріантних розрахунків і вибору оптимального значення X по максимальному виходу формальдегіду за аналогією до методу сканування.

Задача оптимізації реактора окислювання метанолу може бути поставлена таким способом – знайти оптимальний ступінь перетворення метанолу в заданому інтервалі, що забезпечує максимальний вихід продукту при встановлених значеннях всіх вхідних параметрів. При виконанні розрахунків вимога незмінності для більшості вхідних параметрів виконується повністю, вони дійсно є константами, але деякі з них ($T_{хл}$, ω) доводиться дещо змінювати для різних X , щоб виконати обов'язкові технологічні вимоги завдання. Таким

чином, рішення задачі оптимізації реактора знаходиться за визначених додаткових обмежень значень параметрів реактора у вигляді констант чи вузьких інтервалів.

Слід пам'ятати, що усі технологічні параметри реактора повинні бути обрані з урахуванням необхідності досягнення максимального виходу і заданих технологічних обмежень з температури в шарі каталізатора і гідравлічного опору. Вимоги оптимальності варто пам'ятати при виборі діаметра зерен каталізатора для заданого діаметра трубки, при пошуку оптимального температурного режиму в шарі каталізатора.

Розв'язується задача оптимізації шляхом розрахунку різних варіантів роботи реактора з трьома – сьома ступенями перетворення з заданої області його можливих значень і вибору оптимального ступеня перетворення за найбільшим значенням критерію оптимальності – виходу формальдегіду. Технологічні параметри для кожного варіанта підбирають при розрахунку реактора за допомогою програми «Трубчастий реактор» з обов'язковим виконанням умов оптимальності температурного режиму $T_{г.г.} \approx T_{доп.}$ і заданого обмеження $\Delta p \leq \Delta p_{доп.}$

НАВЧАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

- 1) Виконати розрахунок трубчастого реактора для процесу окислювання метанолу у формальдегід за вихідними даними, приведеними у **таблицях 4.8, 3.4 і 3.5.**
- 2) Визначити залежність виходу формальдегіду від ступеня перетворення і побудувати графік цієї залежності.

Таблиця 4.8

Початкові дані загальні для усіх варіантів

Температура паро-газової суміші на вході в реактор, °C	160–190
Гранична допустима температура у трубках, °C	363 – 365
Ступінь перетворення метанолу в реакторі, частки	0,965 – 0,980
Пористість шару каталізатора в трубках, частки	0,41
Швидкість газу в трубках, м/с	1,3 – 2,2
Допустимий гідравлічний опір реактора, МПа	0,03±0,001

НАВЧАЛЬНИЙ ПРИКЛАД

Розрахувати поля концентрацій компонентів і температури в трубчастому реакторі окислювання метанолу та знайти оптимальний ступінь перетворення, що забезпечує максимальне значення виходу формальдегіду для наступних даних:

- температура суміші на вході в реактор, °C 180;
- температура холодоагенту, °C 250 – 280;
- концентрація компонентів на вході в реактор, моль/м³:
 - метанолу – 2,90;
 - формальдегіду – 0,0;
 - води – 0,650;
 - кисню – 3,50;

– внутрішній діаметр трубки, мм

22 ;

Початкові дані, загальні для усіх варіантів, наведені у табл.4.8.

Обираємо діаметр зерна каталізатора в трубчастій частині 5 мм. Співвідношення $4 \leq D_{тр}/D_з \leq 6$ виконується – $d_{тр}/d_з = 4,5$.

Для вибору температури теплоносія були виконані два розрахунки при крайніх значеннях $T_{хл}$ 250 і 280°C. Температура «гарячої точки» для цих значень складає 309 та 390°C. За графіком, побудованим в координатах $T_{хл}$ – $T_{г.т.}$ (рис. 4.13) знаходять значення $T_{хл}$, при якому максимальна $T_{г.т.}$ приблизно дорівнює 365°C. Ця температура теплоносія дорівнює приблизно 270°C.

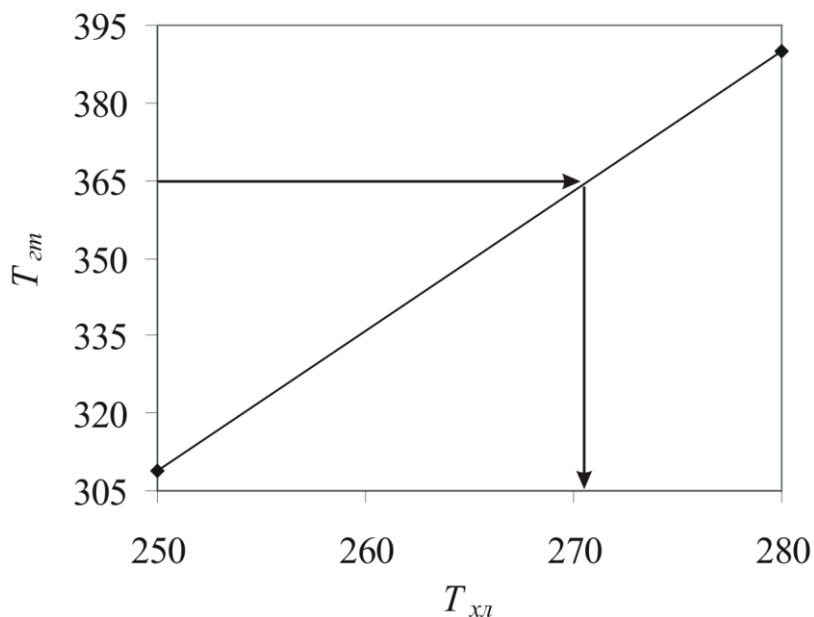


Рис. 4.13. Графік залежності температури «гарячої точки» від температури теплоносія

Результати всіх наступних розрахунків реактора представлені в **табл. 4.9.**

Таблиця 4.9

Результати розрахунків трубчастого реактора

№ вар.	ω	$T_{хл}$	$T_{гт}$	X	Sel	ΔP	τ_k	$X \cdot Sel$
1	1,8	268	361,9					
2	1,8	272	371,9					
3	1,8	269	364,5	0,963				
4	1,8	270	367,0					
5	1,60	264	363,5	0,980	0,946	0,030	0,75	
6	1,62	265	364,9	0,980	0,947	0,030	0,722	0,9281
7	1,66	266	365,0	0,976	0,951	0,030	0,665	0,9282
8	1,70	267	365,1	0,973	0,954	0,030	0,62	0,9282
9	1,74	268	365,3	0,97	0,955	0,030	0,586	0,9264
10	1,77	268,5	364,9	0,968	0,957	0,030	0,565	0,9264
11	1,79	269	365,0	0,965	0,959	0,030	0,536	0,9254

Навколо знайденого значення варіювали температуру холодоагенту $T_{хл}$ таким чином, щоб підібрати таке її значення, при якому температура гарячої точки $T_{г.т.}$ не перевищувала б 365°C . При $T_{хл} = 269^{\circ}\text{C}$ значення $T_{г.т.} = 364,5^{\circ}\text{C}$ (варіант 3). Однак, за цих умов ступінь перетворення низький – $0,963$. Тому необхідно збільшити час контакту. Цього можна досягти або за рахунок збільшення довжини трубки, або за рахунок зменшення лінійної швидкості. Оскільки перепад тиску в реакторі вже складає $0,03$ МПа, то подальше збільшення довжини неможливо. Тому лінійна швидкість зменшується до $1,6$ м/с, і знову підбирається температура холодоагенту $T_{хл}$. У варіанті 5 при $T_{хл} = 264^{\circ}\text{C}$ ступінь перетворення приймає потрібне значення – $0,980$, інші параметри задовольняють обмеженням, але температура гарячої точки трохи нижче необхідного значення – $T_{г.т.} = 363,5^{\circ}\text{C}$.

У варіанті 6 при $T_{хл} = 265^{\circ}\text{C}$ та лінійній швидкості $\omega = 1,62$ м/с значення $T_{г.т.} = 364,9^{\circ}\text{C}$. За цих умов всі параметри задовольняють обмеженням.

Змінюючи значення лінійної швидкості ω , підбираємо температуру холодоагенту $T_{хл}$ таким чином, щоб виконувались задані обмеження з температури в шарі каталізатора і гідравлічного опору. Результати наведено в *табл. 4.9* (варіанти 7–11).

На *рис. 4.14* наведено графік залежності виходу формальдегіду від ступеня перетворення. Видно, що за заданих умов максимум виходу досягається при ступені перетворення $0,975$.

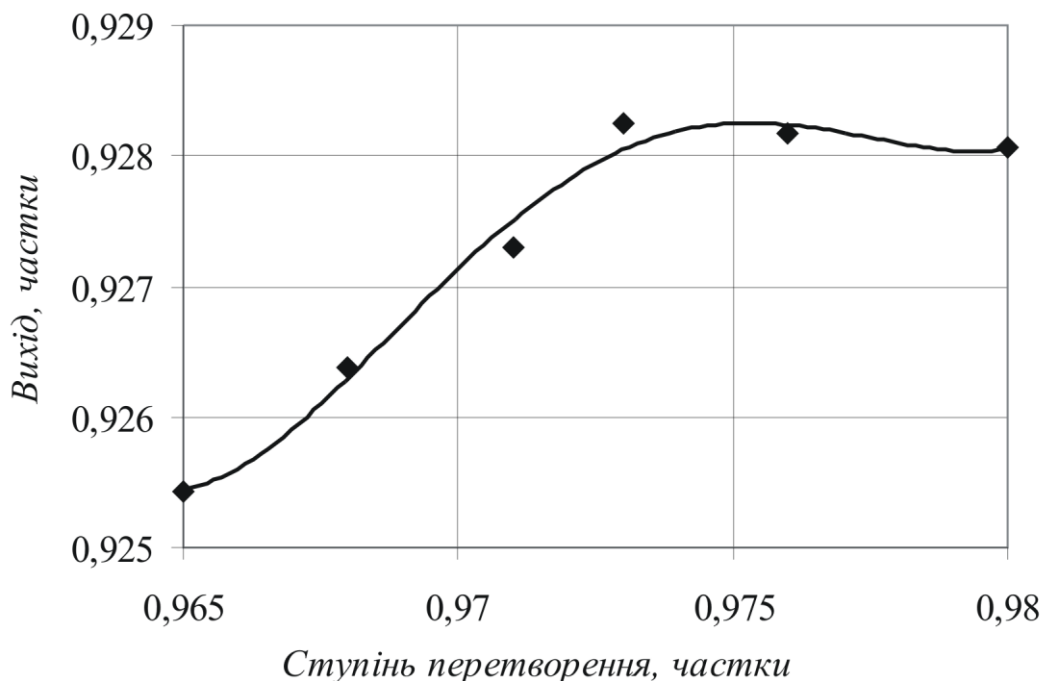


Рис 4.14. Графік залежності виходу формальдегіду від ступеня перетворення

4.5.2. Розрахунок і оптимізація параметрів роботи агрегату одержання безметанольного формаліну

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Провести розрахунки полів концентрацій компонентів і температури в двох частинах комбінованого реактора для окислювання метанолу у формальдегід та на підставі аналізу отриманих результатів визначити технологічні параметри роботи і знайти оптимальні значення часу контакту у трубчастій частині та адіабатичному шарі, що забезпечує максимальне значення виходу формальдегіду.

ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

У комбінованому реакторі каталізатор розташований двома шарами. Перший за рухом газового потоку шар знаходиться в трубках трубчастої частини реактора. Через стінки трубок здійснюється відвід (для екзотермічних процесів) чи підведення (для ендотермічних процесів) тепла за допомогою зовнішнього теплоносія в міжтрубному просторі. Безпосередньо після трубчастої частини газова суміш надходить в адіабатичний шар каталізатора, де хімічний процес проходить без теплообміну з навколишнім середовищем. Схема такого реактора приведена на *рис. 4.15 а*, а графік зміни температури в шарах каталізатора – на *рис. 4.15 б*.

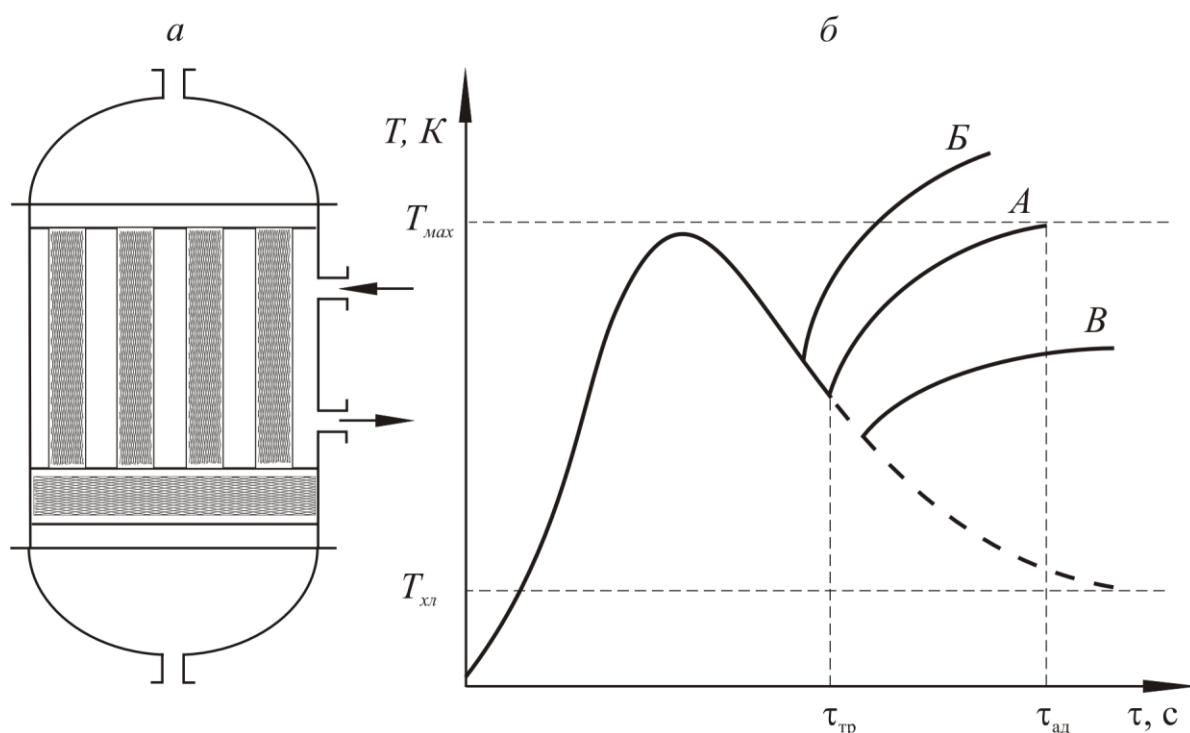


Рис. 4.15. Моделювання процесу окислення метанолу в формальдегід в комбінованому реакторі: а – схема реактора, б – залежність зміни температури від часу контакту при різних значеннях $\tau_{тр}$

Як видно на *рис. 4.15 б* заключна частина хімічного процесу в адіабатичному шарі (показано суцільними лініями А, Б і В) проходить при більш високій температурі, ніж у тому випадку, якби він доводився до того ж ступеня перетворення в більш довгій трубчастій частині (показано пунктирною лінією). У цьому полягає основна перевага комбінованого реактора для процесу окислювання метанолу у формальдегід – умови проведення процесу ближче до теоретично оптимальних і, як наслідок, більш висока селективність хімічного процесу, а отже, і більш високий вихід цільового продукту.

При розрахунку параметрів каталітичних шарів комбінованого реактора використовуються відповідні математичні моделі процесу для трубчастої частини реактора і для шару, що працює в адіабатичних умовах.

Математична модель та опис програми «Трубчастий реактор» наведена у попередньому розділі.

При розрахунку параметрів *адіабатичної* частини реактора використовується модель ідеального витиснення. Для процесу окислювання метанолу і формальдегіду, у якому протікають дві послідовні необоротні реакції, система рівнянь має вид:

$$-\omega \frac{\partial C_M}{\partial \ell} - W_1 = 0 \quad (4.101)$$

$$-\omega \frac{\partial C_\Phi}{\partial \ell} + W_1 - W_2 = 0 \quad (4.102)$$

$$-\omega \frac{\partial C_B}{\partial \ell} + W_1 + W_2 = 0 \quad (4.103)$$

$$-\omega \frac{\partial C_K}{\partial \ell} - \frac{1}{2}(W_1 + W_2) = 0 \quad (4.104)$$

$$-\omega C_p \rho \frac{\partial T}{\partial \ell} + q_1 W_1 + q_2 W_2 = 0 \quad (4.105)$$

$$W_1 = \frac{K_1 C_M}{1 + a_1 C_M + a_2 C_B + a_3 \frac{C_M}{C_K}} \quad (4.106)$$

$$W_2 = \frac{K_2 C_\Phi}{1 + b_1 C_M + b_2 C_B + b_3 \frac{C_\Phi}{C_K}} + \frac{K_3 C_M}{1 + b_4 C_B + b_5 \frac{C_M}{C_K}} \quad (4.107)$$

Граничні умови:

$$\ell = 0; C_M = C_{MВХ}; C_\Phi = C_{\PhiВХ}; C_B = C_{BВХ}; C_K = C_{KВХ}; T = T_{ВХ}, \quad (4.108)$$

Початкові умови:

$$t = 0: C_M = C_M(\ell); C_\Phi = C_\Phi(\ell); C_B = C_B(\ell); C_K = C_K(\ell); T = T(\ell). \quad (4.109)$$

Розрахунок процесів, що протікають в адіабатичному шарі каталізатора, проводиться з використанням програми «Адіабатичний реактор», що входить до складу програмного комплексу «COMPLEX.EXE». Система рівнянь (4.101–

4.109) вирішується методом Рунге-Кутта четвертого порядку точності з автоматичним вибором величини кроку по координаті.

Блок-схема і лістинг програми «COMPLEX. АДІАБАТИЧНИЙ РЕАКТОР» приведені у додатках 8, 9.

У програмі «Адіабатичний реактор» порядок введення вхідних даних наступний:

- температура суміші на вході в шар каталізатора, °С;
- концентрації метанолу, формальдегіду, води і кисню на вході в шар каталізатора, моль/м³;
- концентрації метанолу і формальдегіду на вході в реактор, моль/м³:
 - пористість шару, частки;
 - діаметр зерна каталізатора, м;
 - час контакту, с.

Результати розрахунків виводяться у виді таблиць зміни за довжиною реактора наступних параметрів:

- безрозмірна довжина шару, частки;
- концентрації метанолу, формальдегіду, пари води і кисню, моль/м³;
- температура, °С;
- ступінь перетворення і селективність, частки;
- час контакту, с.

Правила користування програмою такі ж, як і в попередньому випадку.

Отримані результати розрахунку на ЕОМ шару каталізатора в трубках і адіабатичному шарі дозволяють однозначно визначати основні технологічні параметри комбінованого реактора для заданих параметрів процесу – довжину трубок і час контакту в трубчастій частині, швидкість реакційної суміші в трубках з каталізатором, середню температуру зовнішнього теплоносія, що подається в міжтрубний простір для відводу тепла реакції, час контакту для адіабатичного шару з заданим інтервалом по довжині трубки і висоті адіабатичного шару каталізатора, склад і температуру реакційної суміші, безрозмірні характеристики хімічного процесу – ступінь перетворення, селективність і вихід цільового продукту.

МЕТОДИКА РОЗРАХУНКІВ

При розрахунку комбінованого реактора треба визначити оптимальний ступінь перетворення у трубчастій частині реактора та адіабатичному шарі, тобто вирішити задачу оптимізації реактора.

Постановка задач оптимізації розглянута у попередньому розділі.

Як критерій оптимальності при оптимізації комбінованого реактора окислювання метанолу рекомендується вибрати найважливіший технологічний параметр – вихід цільового продукту формальдегіду, який розраховується за формулою (4.98).

В даному випадку, як і в прикладі з трубчастим реактором, оптимальний температурний профіль повинен наближатись до допустимих температур для обох каталітичних зон (*рис. 4.15*, лінія А).

В цілому, в комбінованому реакторі температурний режим ближче до теоретично оптимального, ніж у трубчастому, і, як наслідок, більш висока селективність процесу, а отже, більш високий вихід цільового продукту – формальдегіду. Причому ефективність роботи реактора в основному обумовлюється оптимальним вибором часу контакту в трубчастій частині і в адіабатичному шарі. При більшому, ніж потрібно, часі контакту в трубках реакційна суміш надходить в адіабатичний шар при малому вмісті метанолу і з низькою температурою, що приводить до неефективної роботи шару (*рис. 4.15*, лінія В). При меншому, ніж потрібно, часі контакту суміш надходить з високою температурою і з високим вмістом вихідного компонента. За цих умов можливий перегрів каталізатора на виході з адіабатичного шару (*рис. 4.15*, лінія Б).

Задача оптимізації комбінованого реактора окислювання метанолу може бути поставлена так: знайти оптимальні значення часу контакту у трубчастій частині та адіабатичному шарі, що забезпечують максимальне значення виходу формальдегіду на виході із реактора при встановлених значеннях всіх вхідних параметрів.

Цільову функцію не можна скласти у вигляді аналітичного рівняння на підставі (4.99), але її можна розглядати у загальному вигляді

$$B = F(P_{\text{вх}}, \tau_{\text{тр}}, \tau_{\text{ад}}), \quad (4.110)$$

де $P_{\text{вх}}$ – вхідні параметри програм обох каталітичних зон;

$\tau_{\text{тр}}, \tau_{\text{ад}}$ – час контакту у трубчастій частині та адіабатичному шарі відповідно.

Ця залежність представляє собою математичні моделі трубчастої частини та адіабатичного шару комбінованого реактора, що є системою диференціальних рівнянь.

Функція є багатопараметричною, і це значно ускладнює рішення оптимізаційної задачі, але якщо її виконувати з незмінними вхідними параметрами, змінюючи тільки один – сумарний час контакту ($\tau = \tau_{\text{тр}} + \tau_{\text{ад}}$), можна використати для оптимізації простий метод багатоваріантних розрахунків і вибору оптимального значення τ за максимальним виходом формальдегіду відповідно приведеного нижче алгоритму.

Слід пам'ятати, що усі технологічні параметри реактора повинні бути обрані з урахуванням необхідності досягнення максимального виходу і заданих технологічних обмежень з температури в шарах каталізатора і гідравлічного опору. Вимоги оптимальності варто пам'ятати при виборі діаметра зерен каталізатора для заданого діаметра трубки.

Задачу розрахунку і оптимізації комбінованого реактора доцільно вирішувати з використанням наступного алгоритму. Розрахунок реактора проводиться роздільно, спочатку для трубчастої частини, а потім для адіабатичної.

На початку, у відповідності з методикою розрахунку трубчастого реактора (розділ 4.5.1) по заданим внутрішнім діаметром трубки вибирається розмір зерен каталізатора з урахуванням співвідношення

$$4 \leq D_{\text{тр}}/D_3 \leq 6.$$

Аналогічно трубчастому реактору для трубчастої частини комбінованого реактора підібрати температуру в міжтрубному просторі ($T_{\text{хл}}$), при якому температура «гарячої точки» виявляється досить близькою до допустимої температури, але не перевищує її. Крім того, вибираючи довжину трубки з каталізатором, потрібно врахувати обмеження з гідравлічного опору реактора. Для трубчастої частини, де зосереджено гідравлічний опір каталізатора і всього апарата, можна прийняти умову

$$\Delta P_{\text{тр}} < (0,9-0,95) \Delta P_{\text{р}},$$

де $\Delta P_{\text{тр}}$ і $\Delta P_{\text{р}}$ – гідравлічний опір трубчастої частини і реактора в цілому. Якщо ця умова не виконується, вибирають іншу лінійну швидкість реакційної суміші в трубках, і всю серію розрахунків з підбору температури теплоносія повторюють.

Виконавши окремо розрахунок трубчастої частини, встановити остаточне значення часу контакту для трубчастої частини неможливо. Тому на цьому етапі зупиняються на декількох варіантах часу контакту, при яких ступінь перетворення входить у заданий діапазон і одночасно обов'язково виконуються технологічні обмеження для трубчастої частини комбінованого реактора.

За результатами розрахунків на ЕОМ для всіх прийнятних варіантів з різною довжиною трубок визначають концентрації компонентів у реакційній суміші і температури на виході з трубчастої частини. Ці параметри використовують як вхідні величини для подальшого розрахунку адіабатичного шару за програмою «Адіабатичний реактор». При виконанні розрахунку використовується орієнтований час контакту для адіабатичного шару. Його варто задавати в першому наближенні свідомо більшим, ніж потрібно, наприклад, 0,5 секунди, а потім, виконавши перший розрахунок, зменшити до величини, близької до необхідної. Це дозволить значно скоротити число необхідних розрахунків.

В адіабатичному шарі комбінованого реактора швидкість другої реакції (окислювання формальдегіду) стає порівнянною зі швидкістю першої, а на виході навіть перевищує останню. Тому зміна концентрації формальдегіду в адіабатичному шарі носить екстремальний характер.

Оптимальний час контакту в адіабатичному шарі каталізатора вибирають за максимальним виходом цільового продукту чи за концентрацією формальдегіду з урахуванням обмежень з максимально допустимої температури.

Розрахунок кожного наступного варіанта потрібно виконувати, проаналізувавши результати попереднього. Якщо для розглянутого варіанта температура в адіабатичному шарі перевищує припустиму, приходиться продовжити розрахунки варіантів з більшою довжиною трубок, а якщо температура в шарі виявляється набагато нижче припустимої – з меншою.

Якщо в результаті аналізу отриманих результатів вдається знайти кілька варіантів, що задовольняють вищезгаданим умовам і обмеженням, то перевагу

варто віддати тому з них, для якого вихід продукту, тобто добуток селективності на ступінь перетворення, на виході з реактора виявиться найбільшим.

Таким способом вирішується задача вибору оптимального часу контакту в реакторі. При цьому необхідно пам'ятати, що температура в шарі каталізатора не повинна перевищувати допустиму, але кращі технологічні параметри (селективність і вихід цільового продукту) буде мати реактор з більш високими температурами як у трубчастій частині так, і в адіабатичному шарі.

НАВЧАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Виконати розрахунок і оптимізацію комбінованого реактора для процесу окислювання метанолу у формальдегід за вихідними даними, приведеними у *таблицях 4.10, 3.4 і 3.5.*

Таблиця 4.10

Початкові дані, загальні для усіх варіантів

Температура паро-газової суміші на вході в реактор	(170 – 190)°C
Гранична допустима температура:	
– у трубках	365°C±2
– в адіабатичному шарі	355°C±2
Можливо використовувати зерна каталізатора діаметром, мм	
– у трубках	3; 4; 5; 6
– в адіабатичному шарі	2; 3; 4
Ступінь перетворення метанолу в реакторі, не менш	0,992
Інтервал ступеня перетворення метанолу на виході з трубчастої частини	0,86–0,92
Швидкість газу в трубках (перше наближення)	1,8 м/с
Припустимий гідравлічний опір реактора	0,03±0,001 МПа

НАВЧАЛЬНИЙ ПРИКЛАД

Визначити оптимальні значення часу контакту в трубчастій частині і адіабатичному шарі комбінованого реактора окислювання метанолу для наступних даних:

– температура суміші на вході в реактор, °C	180
– концентрація компонентів на вході в реактор, моль/м ³ :	
– метанолу	3,1
– формальдегіду	0,0
– води	1,0
– кисню –	4,0
– внутрішній діаметр трубки, мм	20
– діаметр зерна каталізатора в адіабатичному шарі, мм	2
– пористість шару в трубчастій частині, частки	0,41
– пористість шару в адіабатичному шарі, частки	0,40.

Початкові дані, загальні для усіх варіантів, наведені у табл. 4.9.

Обираємо діаметр зерна каталізатора в трубчастій частині 4 мм. Співвідношення $4 \leq D_{\text{тр}}/D_3 \leq 6$ виконується – $d_{\text{тр}}/d_3 = 5,0$.

Результати розрахунків для прийнятих параметрів реактора представлені в *табл. 4.11*.

Розрахунок починався з $\omega = 2,0$ м/с при довжині трубки $L = 0,8$ м. Варіюючи температуру холодоагенту $T_{\text{хл}}$, знаходили таке її значення, щоб температура гарячої точки $T_{\text{г.т.}}$ не перевищувала б 365°C . При $T_{\text{хл}} = 262^\circ\text{C}$ значення $T_{\text{г.т.}} = 363,1^\circ\text{C}$ (варіант 3). Однак, за цих умов ступінь перетворення низький – 0,887. Тому необхідно збільшити час контакту. Цього можна досягти або за рахунок збільшення довжини трубки, або за рахунок зменшення лінійної швидкості. Оскільки перепад тиску в реакторі вже складає 0,03 МПа, то подальше збільшення довжини неможливо. Тому лінійну швидкість зменшують до 1,9 м/с і знову підбирають температуру холодоагенту $T_{\text{хл}}$. У варіанті 7 при $T_{\text{хл}} = 260,7^\circ\text{C}$ значення $T_{\text{г.т.}} = 365,5^\circ\text{C}$. За цих умов ступінь перетворення приймає потрібне значення – 0,920, а інші параметри задовольняють обмеженням.

Таблиця 4.11

Результати розрахунків трубчастої частини комбінованого реактора

<i>№ вар.</i>	ω	$T_{\text{хл}}$	$T_{\text{г.т.}}$	X	Sel	ΔP	τ_k
1	2,0	240	274,2				
2	2,0	270	392,2				
3	2,0	262	363,1	0,887		0,030	
4	2,0	263	367,0	0,90		0,030	
5	1,90	260	362,7	0,913		0,029	
6	1,90	261	366,8	0,923		0,029	
7	1,90	260,7	365,5	0,920	0,976	0,029	0,345
7.1	1,90	260,7	365,5	0,903	0,978	0,027	0,318
7.2	1,90	260,7	365,5	0,872	0,980	0,025	0,292
7.3	1,90	260,7	365,5	0,898	0,978	0,026	0,311
7.4	1,90	260,7	365,5	0,893	0,979	0,026	0,305
7.5	1,90	260,7	365,5	0,887	0,979	0,025	0,30

З знайденого варіанту вибираються додаткові значення часу контакту, для яких ступінь перетворення входить у заданий діапазон – варіанти 7.1 та 7.2 (*табл. 4.11*). Для вибраних варіантів 7, 7.1 та 7.2 визначають концентрації компонентів у реакційній суміші і температуру на виході з трубчастої частини (*табл. 4.12*).

Таблиця 4.12

Концентрації компонентів і температура на виході з трубчастій частини

№ вар.	Концентрації компонентів, моль/м ³				Температура, °С	Час контакту
	метанол	формальдегід	вода	кисень		
7	0,247	2,785	3,921	2,540	290,1	0,345
7.1	0,301	2,738	3,861	2,570	302,5	0,318
7.2	0,396	2,650	3,759	2,621	318,0	0,292
7.3	0,316	2,724	3,844	2,578	305,5	0,311
7.4	0,332	2,709	3,826	2,587	308,5	0,305
7.5	0,351	2,692	3,806	2,597	311,6	0,30

Знайдені параметри є вхідними величинами для розрахунку адіабатичного шару за програмою «Адiabатичний реактор». Результати розрахунків представлені в *табл. 4.13*.

Таблиця 4.13

Результати розрахунків адіабатичного шару комбінованого реактора

№ вар.	$T_{вих}$	X	Sel	τ_k	C_ϕ	$B=X \cdot Sel$	Прим.
7	328,8	0,995	0,955	0,180	2,946	0,950	
				0,192	2,945		
7.1	344,4	0,996	0,963	0,139	2,975	0,959	
				0,148	2,975		
7.2	368,3	0,998	0,972	0,110	3,004		$T_{вих} > T_{доп макс}$
				0,116	3,004		
7.3	349,2	0,997	0,964	0,138	2,981	0,961	
				0,145	2,981		
7.4	352,9	0,996	0,967	0,123	2,986	0,963	
				0,130	2,986		
7.5	358,3	0,997	0,968	0,122	2,993		$T_{вих} > T_{доп макс}$
				0,129	2,993		

Як впливає з аналізу отриманих результатів, при зменшенні часу контакту в трубчастій частині з 0,345 до 0,318 с, вихід формальдегіду збільшився з 0,950 до 0,959 (7 та 7.1 у *табл. 4.13*). Подальше зменшення часу контакту до 0,292 с (7.2 у *табл. 4.13*) приводить до перегріву каталізатора на виході з адіабатичного шару.

Очевидно, що оптимальний час контакту в трубчастій частині знаходиться між значеннями 0,318 і 0,292 с.

Не змінюючи вхідних параметрів у трубчастій частині, зменшуємо час контакту в ній до 0,311 (7.3 у *табл. 4.11* і *4.12*). При цьому вихід продукту збільшується – з 0,959 до 0,961 (7.3 у *табл. 4.13*).

Подальше зменшення часу контакту в трубчастій частині до 0,305 с (варіант 7.4) дозволяє одержати на виході з реактора трохи більший вихід продукту – 0,963 (7.4 у *табл. 4.11–4.13*). Однак зменшення часу контакту в трубчастій частині до 0,30 с приводить до перегріву каталізатора на виході з адіабатичного шару (варіант 7.5 у *табл. 4.11–4.13*).

Таким чином, отримані результати дозволяють визначити для заданих вхідних параметрів та обмежень оптимальні значення часу контакту в трубчастій частині – 0,305 с і в адіабатичному шарі – 0,123 с.

4.5.3. Побудова математичного опису елементів технологічної схеми

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Використовуючи детерміновану математичну модель теплообмінного апарата скласти його статистичну модель в матричному вигляді і розрахувати значення елементів матриці перетворення.

Ця задача вирішується на прикладі водяного холодильника схеми гідроочищення дизельного палива (див. розділ 3.7.2) (позиція 5 на технологічній схемі (*рис. 3.10*) або позиція 6 на розрахунковій схемі (*рис. 3.11*).

При виконанні роботи використовуються прикладні програми «GIDRA» та «PFE_2_4». Перша – для розрахунку схеми гідроочищення дизельного палива з метою визначення параметрів потоків теплообмінника базового варіанта за індивідуальним завданням (опис програми – у розд. 3.7.2). Друга – для розрахунків коефіцієнтів функцій відгуку по детермінованій моделі. Опис програми наведено далі.

ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

При розробці експериментально-статистичних моделей елементів ХТС не ставиться задача детального опису закономірностей процесів, що відбуваються в об'єктах моделювання. Математичний опис елемента будується у вигляді регресійних залежностей вихідних параметрів об'єкта від вхідних змінних і являє собою звичайно лінійні чи нелінійні поліноміальні рівняння.

Методика утворення експериментально-статистичних моделей елементів ХТС приведена у розділі 4.4.

Побудову матриці перетворення за допомогою ПФЕ розглянемо на прикладі противоточного кожухотрубчастого теплообмінника (*рис. 4.9*)

Детермінована модель теплообмінника даного типу (4.75) приведена в розділі 4.4.

В якості впливаючих факторів (вхідних змінних) були вибрані:

x_1 (g_x) – масова витрата холодного теплоносія, кг/с;

x_2 (g_r) – масова витрата гарячого теплоносія (реакційної суміші), кг/с;

x_3 ($t_{x,n}$) – початкова температура холодного теплоносія, °С;

x_4 ($t_{r,n}$) – початкова температура гарячого теплоносія, °С.

Базові рівні, що визначені при розрахунку схеми за допомогою програми «GIDRA», і обрані інтервали варіювання факторів приведені в **табл. 4.14**.

В якості функції відгуку (вихідних параметрів) були вибрані:

$y_1(t_{г.к})$ – кінцева температура холодного теплоносія, °С;

$y_2(t_{г.к})$ – кінцева температура гарячого теплоносія, °С.

Таблиця 4.14

Умови проведення чисельних експериментів на детермінованій моделі теплообмінника за допомогою ЕОМ

Найменування	x_1	x_2	x_3	x_4
Базовий рівень	18,06	22,44	25	71
Інтервал варіювання	2,0	3,0	5	10
Нижній рівень	16,06	19,44	20	61
Верхній рівень	20,06	25,44	30	81

Для побудови матриці перетворення теплообмінника використовували ПФЕ типу 2^4 . Матриця планування в розмірній і кодованій формі і результати її реалізації на детермінованій моделі теплообмінника приведені в **табл. 4.15**. Розрахунок проведено за допомогою програми «PFE_2_4.EXE», лістинг якої наведено в додатку 8.

Таблиця 4.15

Матриця планування і результати її реалізації на детермінованій моделі теплообмінника

Номер досліджу	Фактори								Функція відгуку	
	у розмірних значеннях				у кодованих значеннях					
	x_1	x_2	x_3	x_4	X_1	X_2	X_3	X_4	y_1	y_2
1	16,06	19,44	20	61	-1	-1	-1	-1	39,29	29,84
2	20,06	19,44	20	61	+1	-1	-1	-1	35,97	28,78
3	16,06	25,44	20	61	-1	+1	-1	-1	41,57	34,38
4	20,06	25,44	20	61	+1	+1	-1	-1	38,09	33,12
5	16,06	19,44	30	61	-1	-1	+1	-1	44,59	37,44
6	20,06	19,44	30	61	+1	-1	+1	-1	42,08	36,64
7	16,06	25,44	30	61	-1	+1	+1	-1	46,31	40,87
8	20,06	25,44	30	61	+1	+1	+1	-1	43,68	39,92
9	16,06	19,44	20	81	-1	-1	-1	+1	48,71	34,65
10	20,06	19,44	20	81	+1	-1	-1	+1	43,76	33,07
11	16,06	25,44	20	81	-1	+1	-1	+1	52,10	41,39
12	20,06	25,44	20	81	+1	+1	-1	+1	46,91	39,52
13	16,06	19,44	30	81	-1	-1	+1	+1	54,00	42,25
14	20,06	19,44	30	81	+1	-1	+1	+1	49,87	40,92
15	16,06	25,44	30	81	-1	+1	+1	+1	56,84	47,88
16	20,06	25,44	30	81	+1	+1	+1	+1	52,50	46,32

Для розрахунків за програмою потрібно ввести наступні вхідні дані:

k_T – коефіцієнт теплопередачі, $k_T = 216 \text{ Вт} / (\text{м}^2 \cdot \text{К})$;

F – поверхня теплопередачі, $F = 400 \text{ м}^2$;

x – масив значень вхідних змінних у такому порядку:

x_1 – масова витрата холодного теплоносія, кг/с;

x_2 – масова витрата гарячого теплоносія (реакційної суміші), кг/с;

x_3 – початкова температура холодного теплоносія, °С;

x_4 – початкова температура гарячого теплоносія, °С;

B – масив інтервалів варіювання відповідних вхідних змінних x .

За формулами (4.69) і (4.70) розраховуємо коефіцієнти регресії. Наприклад, для залежності $t_{x,k}$ від впливаючих факторів:

$$y_1(t_{x,k}) = b_0 + b_1X_1 + b_2X_2 + b_3X_3 + b_4X_4.$$

Вільний член:

$$b_0 = 1/16 \cdot (39,29 + 35,97 + 41,57 + 38,09 + 44,59 + 42,08 + 46,31 + 43,68 + 48,71 + 43,76 + 52,10 + 46,91 + 54,0 + 49,87 + 56,84 + 52,50) = 46,02.$$

Визначимо коефіцієнти при лінійних членах:

$$b_1 = 1/16 \cdot (-39,29 + 35,97 - 41,57 + 38,09 - 44,59 + 42,08 - 46,31 + 43,68 - 48,71 + 43,76 - 52,10 + 46,91 - 54,0 + 49,87 - 56,84 + 52,50) = -1,91;$$

$$b_2 = 1,23; \quad b_3 = 2,72; \quad b_4 = 4,57.$$

За співвідношенням (4.67) перетворимо рівняння на розмірну форму:

$$X_1 = (x_1 - 18,06)/2;$$

$$X_2 = (x_2 - 22,44)/3;$$

$$X_3 = (x_3 - 25)/5;$$

$$X_4 = (x_4 - 71)/10.$$

Після перетворення одержимо:

$$y_1 = 8,025 - 0,955 \cdot x_1 + 0,411 \cdot x_2 + 0,543 \cdot x_3 + 0,457 \cdot x_4.$$

Виконавши аналогічні розрахунки, для y_2 маємо наступне рівняння регресії:

$$y_2 = -12,75 - 0,325 \cdot x_1 + 0,830 \cdot x_2 + 0,719 \cdot x_3 + 0,281 \cdot x_4.$$

Таким чином, математична модель теплообмінника може бути записана в матричному вигляді:

$$\begin{bmatrix} t_{x,k} \\ t_{r,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} & a_{15} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} & a_{25} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} g_x \\ t_{x,\Pi} \\ g_r \\ t_{r,\Pi} \\ 1 \end{bmatrix},$$

де $a_{11} = -0,955$; $a_{21} = -0,325$; $a_{12} = 0,411$; $a_{22} = 0,830$; $a_{13} = 0,543$; $a_{23} = 0,719$;
 $a_{14} = 0,457$; $a_{24} = 0,281$; $a_{15} = 8,025$; $a_{25} = -12,75$.

ОПИС ПРОГРАМИ «PFE_2_4»

Програма «PFE_2_4.EXE» використовується для визначення функції відгуку за рівнянням (4.75). Для розрахунку необхідно задати відповідні початкові дані:

K – коефіцієнт теплопередачі, Вт/(м²·К);

F – поверхня теплопередачі, м²;

C_g – теплоємність гарячого потоку, Дж/(кг·К);

C_x – теплоємність холодного потоку, Дж/(кг·К).

Параметри на базовому рівні:

$x_1 (g_x)$ – масова витрата холодного теплоносія, кг/с;

$x_2 (g_r)$ – масова витрата гарячого теплоносія (реакційної суміші), кг/с;

$x_3 (t_{x,n})$ – початкова температура холодного теплоносія, °С;

$x_4 (t_{r,n})$ – початкова температура гарячого теплоносія, °С.

Інтервали варіювання:

b_1 – по масовій витраті холодного теплоносія, кг/с;

b_2 – по масовій витраті гарячого теплоносія, кг/с;

b_3 – по початковій температурі холодного теплоносія, °С;

b_4 – по початковій температурі гарячого теплоносія, °С.

Результатом роботи програми є таблиця значень факторів у розмірних та кодованих значеннях та функції відгуку. Крім того, в програмі розраховуються коефіцієнти лінійної моделі. Лістинг програми «PFE_2_4.EXE» наведено в додатку 8.

МЕТОДИКА РОЗРАХУНКІВ

- 1) Розрахувати параметри потоків базового варіанта роботи схеми гідроочищення дизельного палива за заданою продуктивністю, за сировиною за допомогою програми «GIDRA.EXE».
- 2) З результатів розрахунку вибрати витрати і температури гарячого і холодного теплоносіїв водяного холодильника (елемент 6 розрахункової схеми) на вході і виході. Фізико-хімічні константи теплоносіїв наведені нижче.
- 3) Скласти матрицю планування розрахункового експерименту на детермінованій моделі, використовуючи повний факторний експеримент для чотирьох факторів з варіюванням на двох рівнях (ПФЕ 2).
- 4) Розрахувати параметри детермінованої моделі n , m і r і скласти детерміновану модель теплообмінника.
- 5) Розрахувати функції відгуку (вихідні параметри теплообмінника) для всіх точок розрахункового експерименту, вибравши за рекомендаціями інтервали варіювання вхідних 4-х параметрів.
- 6) Обробити результати повного факторного експерименту і розрахувати коефіцієнти лінійних регресій з вхідними параметрами в закодованому виді і

в розмірній формі. При виконанні пунктів 4–6 можна використовувати програму «PFE_2_4.EXE».

- 7) Записати лінійну спрощену модель теплообмінника. Розрахувати за моделлю значення вихідних параметрів для основного варіанта (0-точка) і порівняти їх із знайденим раніше при розрахунку схеми.
- 8) Скласти модель теплообмінника в матричній формі.

НАВЧАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Продуктивність по сировині 72000–75000 кг/год.

Зокрема – з'єднання сірки 75 кг/год., дизельне паливо по залишку.

Решта початкових даних для розрахунку схеми (вхідні параметри програми «GIDRA») – за контрольним прикладом.

Властивості теплоносіїв для водяного холодильника

Гарячий теплоносій – ПГС після реактора

Густина, кг/м ³	вхід 100,9	вихід 106,8
Теплоємність, кДж/(кг·К)	вхід 2,183	вихід 2,099
Теплопровідність, Вт/(м·К)	вхід 4,889E–2	вихід 4,492E–2
В'язкість, Па·с	вхід 20,66E–5	вихід 19,68E–5

Холодний теплоносій – вода

Густина, кг/м ³	вхід 997	вихід 981
Теплоємність, кДж/(кг·К)	вхід 4,185	вихід 4,183
Теплопровідність, Вт/(м·К)	вхід 60,9E–2	вихід 66,2E–2
В'язкість, Па·с	вхід 902E–6	вихід 448E–6

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. *Арис Р.* Анализ процессов в химических реакторах. – Л.: Химия, 1967. – 328 с.
2. *Бесков В.С., Сафронов В.С.* Общая химическая технология и основы промышленной экологии: Учеб. для студентов хим. -технол. спец. вузов. – М.: Химия, 1999. – 469 с.
3. *Бесков В.С., Флокк В.* Моделирование химических процессов и реакторов. – М.: Химия, 1991. – 256 с.
4. *Брайнес Я.М.* Введение в теорию и расчеты химических и нефтехимических процессов. – М.: Химия, 1976.
5. *Вейлас С.* Химическая кинетика и расчеты промышленных реакторов. – М.: Химия, 1967. – 416 с.
6. *Закгейм А.Ю.* Введение в моделирование химико-технологических процессов. – М.: Химия, 1982. – 288 с.
7. *Кафаров В.В., Глебов М.Б.* Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высшая школа, 1991. – 400 с.
8. *Лебедев Н.Н., Манаков М.Н., Швец В.Ф.* Теория химических процессов основного органического и нефтехимического синтеза. – М.: Химия, 1984.
9. Методы и средства автоматизированного расчета химико-технологических систем. / *Н.В.Кузичкин, С.Н.Саутин, А.Е.Путин и др.* – Л.: Химия, 1987.
10. *Островский Г.М., Волин Ю.М.* Моделирование сложных химико-технологических схем. – М.: Химия, 1975. – 311 с.
11. *Островский Г.М., Бережинский Т.А., Беляева А.Р.* Алгоритмы оптимизации химико-технологических схем. – М.: Химия, 1978.
12. Расчеты химико-технологических процессов / *Под ред. И.П.Мухленова.* – Л.: Химия, 1982. – 248 с.
13. *Слинько М.Г.* Моделирование химических реакторов. – Новосибирск: Наука, 1968. – 95 с.
14. *Смирнов Н.Н., Волжанский А.И. Плесовских В.А.* Химические реакторы в примерах и задачах. – С.-П.: Химия, 1994. – 275 с.
15. Химико-технологические системы. Синтез. Оптимизация. Управление / *Под ред. И.П.Мухленова.* – С.-П.: Химия, 1986. – 424 с.
16. *Царева З.М., Орлова Е.И.* Теоретические основы химической технологии. – Киев: Вища школа, 1986. – 271 с.
17. *Царева З.М., Товажнянский Л.Л., Орлова Е.И.* Основы теории химических процессов. Компьютерный курс. Харьков: ХГПУ, 1997. – 624 с.
18. *Брем В.В., Білоус В.М., Макаров О.В., Борщ О.А.* Методи автоматизованих розрахунків хіміко-технологічних систем. Одеса, 2011. – 228 с

ДОДАТКИ

Додаток 1

Лістинг головного розрахункового модуля програми «RIKAS.EXE»

```
#include "complex.hpp"

/*-----*/
/*          Програма P06 "RICAS"
*****
Расчет числа реакторов идеального смешения в каскаде
обеспечивающем достижение заданной степени превращения
при проведении реакции A --> R произвольного порядка N
с использованием метода Ньютона.
*****
***** */
/*-----*/

int sloy(float *a5)
{
    int j,i,I,zu;
    float  CA[20],V[20],PV[20],XAK[20],R[200];
    float  VR, VL, N, KT, CA0, XK, ITmax, EPS, TAU, DF, F, S;
    FILE   *rezsl
                                ;

    VR=a5[0]; VL=a5[1]; N=a5[2]; KT=a5[3]; CA0=a5[4]; XK=a5[5];
    ITmax=a5[6]; EPS=a5[7];

    // VR=0.2; VL=0.4; N=0.76; KT=1.6; CA0=1.2; XK=0.95; ITmax=20;
    EPS=0.001;

    if( a5[1]<=0 ) return  2;

        if( ( rezsl=fopen("sloy.out","w") ) != NULL )
            Print_sl( rezsl, 0, j, V, CA, XAK, a5 );
        else return 11;

    zu=0;
    do
        { CA[zu]=0; V[zu]=0; PV[zu]=0; XAK[zu]=0;
          R[zu]=0;; zu=zu+1;
        }
    while(zu<20);

    j=1; CA[0]=CA0; PV[0]= 1;
    TAU=VR/VL;

M410:
    V[j]=1;
    R[j]=KT*TAU*pow(CA[j-1], (N-1));

    // ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫЕ ИТЕРАЦИИ
```

```

for (I=0; I<=ITmax; I=I+1)
{
    if (DF==0)
    {
        _Mess(1); Print_sl( rezsl, 4, j, V, CA, XAK, a5 ); goto tend;
    }
    DF=(N*R[j]*pow(V[j], (N-1))+1);
    F=R[j]*pow(V[j], N)+V[j]-1;
    S=F/DF;

    if (S<=EPS) goto neXXt;
    V[j]=V[j]-S;
}

// НЕТ СХОДИМОСТИ
_Mess(0); Print_sl( rezsl, 3, j, V, CA, XAK, a5 ); goto tend;

neXXt:
    CA[j]=CA[j-1]*V[j];
    PV[j]=PV[j-1]*V[j];
    XAK[j]=1-PV[j];

// ПРОВЕРКА УСЛОВИЯ ОКОНЧАНИЯ РАСЧЕТА
if (XAK[j]<XK) {j=j+1; goto M410;}

Print_sl( rezsl, 1, j, V, CA, XAK, a5 );
tend: fclose( rezsl );
return 0;
}

```

Лістинг головного розрахункового модуля програми «GAZO.EXE»

```

#include "gazo.hpp"

int Kinet(int Sort,float *X,float *a);
int Print_To_Array(float,float *,float,float);
int Schetchik=11;
extern uint Window_Mess_Field;
extern float F[4];
extern char *Outfile[10000];

int Count(float *a,int SubstSel,int Substance,int Flag)
{
#define TitleFile(_a,_b,_c)
if( (Outfile[_a]=(char *)calloc(81,sizeof(char))) != NULL )\
sprintf(Outfile[_a],_b,_c); else return 11;

register int i=0,Proc;
float Print=0.1,Pr=0,Tau=0,Sp=0,KS1=0,B,H=0.02,D,D1,Qq,
X[4],V[4],R[4],S[4],Y[4];
char *NumSub[18]={
"Оксида углерода","Метана","Бутана","Пентана","Гептана","Декана",
"Бензола","Толуола","Ксилола","Стирола","Этанола","Бутанола",
"Фенола","Ацетона","Фурфурола","Акролеина","Этилацетата",
"Уксусной кислоты"
};
if(Substance==0 && Flag==0) return 1;
if(a[2]<160 || a[2]>700 ) return 3;
if(a[3]<=0 || a[3]>9 ) return 4;
if(a[4]<=0 || a[4]>7 ) return 5;

do{X[i]=0; i=i+1;}while(i<5); i=0;
if(Window_Mess_Field!=2)BotMsg("Производится расчет.,"Ждите...");
TitleFile(0,"Дата : %s" ,Sys_Date())
TitleFile(1,"Время: %s" ,Sys_Time())
TitleFile(2,"%s"," Расчет адиабатического слоя катализатора")
TitleFile(3," Процесс очистки отходящих газов от %s",
NumSub[SubstSel])
TitleFile(4,"%s"," Исходные данные:")
TitleFile(5,"Температура..... %6.2f",a[2])
TitleFile(6,"Концентрация..... %5.2f",a[3])
TitleFile(7,"Время контакта..... %6.4f",a[4])
TitleFile(8,"%s","_____")
TitleFile(9,"%s","Координата, Температура, Концентрация, Степ.
прев., Время конт.")
TitleFile(10,"%s"," доли °С % об. доли с ")

TW_SavW(0);
B=a[3];
for(i=2; i<4; i++) V[i]=a[i];
if( (Proc=Print_To_Array(KS1,a,Sp,Tau)) == 1) return 11;

```

```

    V[2]+=273;
m1: H/=2;

m2: for(i=2; i<4; i++) { Y[i]=V[i]; X[i]=V[i]; }
    i=Kinet(SubstSel,X,a);
    if(errno!=0 || i==1) return 12;
    for(i=2; i<4; i++) { R[i]=F[i]*H; X[i]=Y[i]+R[i]/3; }
    i=Kinet(SubstSel,X,a);
    if(errno!=0 || i==1) return 12;
    for(i=2; i<4; i++) X[i]=Y[i]+R[i]/6 + F[i]*H/6;
    i=Kinet(SubstSel,X,a);
    if(errno!=0 || i==1) return 12;
    for(i=2; i<4; i++) {S[i]=F[i]*H; X[i]=Y[i]+R[i]/8+3*S[i]/8;}
    i=Kinet(SubstSel,X,a);
    if(errno!=0 || i==1) return 12;
    for(i=2; i<4; i++)
    {X[i]=Y[i]+R[i]/2-3*S[i]/2+2*F[i]*H; S[i]=F[i]*H;}
    i=Kinet(SubstSel,X,a);
    if(errno!=0 || i==1) return 12;
    for(i=2; i<4; i++) Y[i]=Y[i]+R[i]/6+2*S[i]/3+F[i]*H/6;
    Qq=0;
    for(i=2; i<4; i++)
    {
        D=fabs( (X[i]-Y[i])/5 );
        D1=32*D;
        if(D>0.0001) goto m1;
        if(D1>0.001) goto m6;
        Qq=2;
    }
m6:
    if(KS1<Pr) goto m3;
    X[2]-=273; KS1+=H; Tau=a[4]*KS1; Sp=(B-X[3])/B;
    if( (Proc=Print_To_Array(KS1,X,Sp,Tau)) == 1) return 11;
    X[2]+=273; Pr+=Print; goto m7;
m3: KS1+=H;

m7: if(X[3]<0.000001) goto m5;
    D1=fabs(1-KS1);
    if(D1<0.0001) goto m4;
    if(KS1<1.0001) goto m4;
    KS1-=H; H=1-KS1; goto m2;

m4: for(i=2; i<4; i++) V[i]=X[i];
    if(D1<0.0001) goto m5;
    H*=2;
    if(Qq>1) goto m1;
    goto m2;

m5: X[2]-=273; Tau=a[4]*KS1; Sp=(B-X[3])/B;
    if( (Proc=Print_To_Array(KS1,X,Sp,Tau)) == 1) return 11;
L:
    if( (Outfile[Schetchik]=(char *)calloc(81,sizeof(char))) != NULL )

```

```

        sprintf(Outfile[Schetchik], "%s", "-----");
    else return 11;
    return 0;
}

int Print_To_Array(float Koord, float* Xx, float Convers, float
ContactTime)
{
register int i;
if( (Outfile[Schetchik]=(char *)calloc(90, sizeof(char))) != NULL )
{
sprintf(Outfile[Schetchik], " %05.3f %06.2f %06.3f %06.4f
%06.4f ", Koord, Xx[2], Xx[3], Convers, ContactTime);
Schetchik++;
}
else return 1;
return 0;
}

int Kinet(int Sort, float *X, float *a)
{
register int AdRaz;
float Const1, Const2, Const3, Const4, W=0;

switch((int)Sort)
{
case 0: AdRaz=91 ; Const1=600 ; Const2=-7600 ; break;
//Оксид углерода
case 1: AdRaz=297 ; Const1=1.140e6; Const2=-19017; break;
//Метан
case 2: AdRaz=868 ; Const1=7.7e5 ; Const2=-16600; break;
//Бутан
case 3: AdRaz=1179; Const1=1.180e5; Const2=-13700; break;
//Пентан
case 4: AdRaz=1495; Const1=0.438e5; Const2=-10300; break;
//Гептан
case 5: AdRaz=2050; Const1=1.45e6 ; Const2=-15000; break;
//Декан
case 6: AdRaz=1101; Const1=1.2e5 ; Const2=-11000; break;
//Бензол
case 7: AdRaz=1318; Const1=25100 ; Const2=-11430; break;
//Толуол
case 8: AdRaz=1413; Const1=1.45e6 ; Const2=-15000; break;
//Ксилол
case 9: AdRaz=1483; Const1=1.20e5 ; Const2=-11000; break;
//Стирол
case 10: AdRaz=410 ; Const1=1.09e6 ; Const2=-14900; break;
//Этанол
case 11: AdRaz=907 ; Const1=1.6e5 ; Const2=-11610; break;
//Бутанол
case 12: AdRaz=996 ; Const1=1.2e5 ; Const2=-11000; break;

```



```

//Фенол
case 13: AdRaz=597 ; Const1=1.6e5 ; Const2=-11900; break;
//Ацетон
case 14: AdRaz=775 ; Const1=1900 ; Const2=-7200 ; break;
//Фурфурол
case 15: AdRaz=428 ; Const1=0.147e4; Const2=-5300 ; Const3=5.5;
Const4=5100; break;
case 16: AdRaz=751 ; Const1=205 ; Const2=-4830 ; Const3=2.35e-16;
Const4=-10730; break;
case 17: AdRaz=291 ; Const1=0.403e6; Const2=-13600; Const3=6.06;
Const4=4530;
}

if(W>1e29 || F[2]>1e29 || F[3]>1e29) return 1;
if(Sort==15 || Sort==16 || Sort==17)
W=(X[3]*(Const1*exp(Const2/(1.987*X[2]))))/
(1+Const3*exp(Const4/(1.987*X[2]))*X[3]);
if(Sort==0)
{ if(X[3]<10e-10) { X[3]=0; W=0; }
else W=pow(X[3],0.69)*( Const1*exp(Const2/(1.987*X[2])) );
}
if(Sort!=15 && Sort!=0 && Sort!=16 && Sort!=17)
W=X[3]*( Const1*exp(Const2/(1.987*X[2])) );
F[3]=-a[4]*W;
F[2]=-F[3]*AdRaz;
return 0;
}

```

Лістинг програми "СХЕМА" програмного комплексу «COMPLEX.EXE»

```

#include "complex.hpp"
/*
  px[0] - производительность установки по формалину, т/год
  px[1] - степень превращения, доли
  px[2] - селективность по формальдегиду, доли

  px[3] - заданная концентрация метанола на входе, моль/куб.м
  px[4] - заданная концентрация кислорода на входе, моль/куб.м

  px[5] - заданная концентрация воды на входе, моль/куб.м
  Ck[0] - текущая концентрация метанола на входе, доли
  Ck[1] - текущая концентрация кислорода на входе, доли
  Ck[2] - текущая концентрация воды на входе, доли
  SUM1 - суммарная подача на входе в реактор, кмоль/ч
  DS - доля сдувки
  DR - доля рецикла (1-DS)
  N - счетчик количества операций
  A - мольное соотношение кислород/метанол
*/
int схема( float *px )
{
  unsigned int N,Prov,Nu;
  int Q[3],i,j, ZuKa = 0;
  float SUM1,DBB,DBR,DS,DR,PP,A,Metanol,KisLorod;
  float K[8],S[9],KU[2],Ck[3],CkM[3],Cz[3],U[4];
  float WW1[11],WW2[11],WW3[11],WW4[11],WW5[11],WW6[11];
  float X[6][11], DelTa;
  float A0,A1,A2,A12,A21,Y_[10],SummY51_,SummY52_;

  static char f[1][7]={ "%04.0u" };
  static char s[1][7];

  FILE *rezcx;

  memset(X,0,400) ;

  if( px[0] <= 0 || px[0] > 1000 ) return(1);
  if( px[1] <= 0 || px[1] > 1 ) return(2);
  if( px[2] <= 0 || px[2] > 1 ) return(3);
  if( px[3] < 0.3 || px[3] > 7 ) return(4);
  if( px[4] <= 0.3 || px[4] > 8.7 ) return(5);
  if( px[5] < 0.2 || px[5] > 5.7 ) return(6);
  if( px[6] < 0 || px[6] > 9 ) return(7);

  ZuKa = 0; DelTa = px[6];

```

```

Metanol = px[3]; KisLorod = px[4];

    BotMsg("Стартовый расчет.", "Исходный вариант");

    if( ( rezcx=fopen("схема.out", "w") ) != NULL )
        Print_cx(
rezcx, DS, DR, CkM, px, 0, WW1, WW2, WW3, WW4, WW5, WW6, Nu, Y_, A0, A1, A2, A12);
        else return 14;

PyatjRaz:

    Cz[0]=px[3]/44.6;      Cz[1]=px[4]/44.6;      Cz[2]=px[5]/44.6;
WW1[0]=0;

// Перевод массовой производительности в мольную, кмоль/ч
    N=0; X[0][2]=1.5*px[0]; X[1][0]=X[0][2]*Cz[1]/Cz[0];
    DS=0.333; DR=1-DS; Q[0]=0; Q[1]=0; Q[2]=0; DBB=0;
M11: X[1][0]=X[0][2]*Cz[1]/Cz[0]; X[2][0]=X[1][0]*3.76;
M1 : N=N++;
    for( i=0; i<6; i++ )
        {X[i][10]=X[i][9]; X[i][1]=X[i][0]+X[i][10];
X[i][3]=X[i][1]+X[i][2]; }
    X[0][3]=X[1][3]*0.81; X[0][4]=X[0][3]*(1-px[1]);
    X[1][4]=X[1][3]-X[0][3]*px[1]*(0.5*px[2]+1-px[2]);
    X[2][4]=X[2][3];
    X[3][4]=X[3][3]+X[0][3]*px[1]*(px[2]+(1-px[2])*2);
    X[4][4]=X[4][3]+X[0][3]*px[1]*px[2];
    X[5][4]=X[5][3]+X[0][3]*px[1]*(1-px[2]);
    X[1][7]=X[1][4]; X[2][7]=X[2][4]; X[5][7]=X[5][4];
    X[3][7]=0.02*(X[1][7]+X[2][7]+X[5][7]); X[0][6]=X[0][4];
    X[4][6]=X[4][4];
    X[3][6]=2.96*X[4][6]; X[3][5]=X[3][6]-X[3][4]+X[3][7];
    for( i=0; i<6; i++ )
        {X[i][8]=X[i][7]*DS; X[i][9]=X[i][7]-X[i][8]; }
// Проверка сходимости результатов
    if( X[0][9] != X[0][10] || X[1][9] != X[1][10] || X[2][9] !=
X[2][10] || X[3][9] != X[3][10] || X[4][9] != X[4][10] || X[5][9]
!= X[5][10] )
        goto M1; DBB=0; S[0]=0;
    for( i=0; i<6; i++ ) S[0]=X[i][9]+S[0];
    DBR=X[3][9]/S[0]; /*_Mess(1);*/ Prov=0; goto M25;
//Блок выхода на требуемую концентрацию метанола
M21: Q[0]=1;
M13: if( Ck[0]==Cz[0] ) { Prov=5; goto M25; }
    X[0][2]=X[0][2]*(Ck[0]-1)/(Cz[0]-1);
//Второй цикл итераций
M2 : N=N++;
    for( i=0; i<6; i++ )
        {X[i][10]=X[i][9]; X[i][1]=X[i][0]+X[i][10];
X[i][3]=X[i][1]+X[i][2]; }
    X[0][4]=X[0][3]*(1-px[1]); X[1][4]=X[1][3]-
X[0][3]*px[1]*(0.5*px[2]+1-px[2]);

```

```

X[2][4]=X[2][3]; X[3][4]=X[3][3]+X[0][3]*px[1]*(px[2]+(1-
px[2])*2);
X[4][4]=X[4][3]+X[0][3]*px[1]*px[2];
X[5][4]=X[5][3]+X[0][3]*px[1]*(1-px[2]);
X[1][7]=X[1][4]; X[2][7]=X[2][4]; X[5][7]=X[5][4];
X[3][7]=0.02*(X[1][7]+X[2][7]+X[5][7]); X[0][6]=X[0][4];
X[4][6]=X[4][4];
X[3][6]=2.96*X[4][6]; X[3][5]=X[3][6]-X[3][4]+X[3][7];
for( i=0; i<6; i++ )
{ X[i][8]=X[i][7]*DS; X[i][9]=X[i][7]-X[i][8]; }
// Проверка сходимости результатов
if( X[0][9] != X[0][10] || X[1][9] != X[1][10] || X[2][9] !=
X[2][10] || X[3][9] != X[3][10] || X[4][9] != X[4][10] || X[5][9]
!= X[5][10] ) goto M2; S[1]=0;
for( i=0; i<6; i++ ) S[1]=X[i][3]+S[1]; SUM1=S[1];
Ck[0]=X[0][3]/SUM1;
if( fabs(Cz[0]-Ck[0]) > 0.00001 ) goto M13; DBB=0; S[2]=0;
for( i=0; i<6; i++ ) S[2]=X[i][9]+S[2]; DBR=X[3][9]/S[2];
Prov=1; goto M25;
//Выход на заданную концентрацию кислорода
M22:
Q[1]=1; S[3]=0;
for( i=0; i<6; i++ ) S[3]=X[i][3]+S[3]; SUM1=S[3];
Ck[1]=X[1][3]/SUM1;
if( Ck[1]==Cz[1] ) { Prov=7; goto M25; }
//Расчет доли рецикла по Cz[1]
DBB=0; S[4]=0;
for( i=0; i<6; i++ ) S[4]=X[i][9]+S[4]; DBR=X[3][9]/S[4];
M33:
K[0]=X[0][3]*(Cz[1]/Cz[0]); K[1]=X[0][3]*(Cz[1]/Cz[0]-
px[1]*(1-0.5*px[2]));
S[5]=0; S[6]=0;
for( i=0; i<6; i++ )
{ S[5]=X[i][0]+S[5]; S[6]=X[i][2]+S[6]; }
K[2]=S[5]/X[1][0]; K[3]=S[6]; K[4]=K[2]-1-DBB*K[2];
K[5]=X[0][3]*px[1]*(1-px[2]);
K[6]=(SUM1-K[3])*(1-DBR); K[7]=K[2]*(1-DBR);
U[0]=-K[1]*(1-K[7]+K[4]); U[1]=K[1]+K[4]*K[0]+K[5]+K[6]-
K[0]*K[7]-K[1]*K[7];
U[2]=-K[6]+K[7]*K[0]; U[3]=pow(U[1],2)-4*U[0]*U[2];
if( U[3] < 0 ) Warning_Err(" Ошибка открытия файла!",18);
KU[0]=(-U[1]+sqrt(U[3]))/(2*U[0]);
KU[1]=(-U[1]-sqrt(U[3]))/(2*U[0]);
for( i=0; i<2; i++ )
{
if( KU[i] > 0 && KU[i] < 1 )
{
DR=KU[i]; DS=1-DR; X[1][0]=K[0]-K[1]*DR;
X[2][0]=X[1][0]*79/21;
X[3][0]=DBB*(X[1][0]+X[2][0]); goto M32;
}
}
}

```

```

Warning_Err(" Ошибка открытия файла!",18);
//Третий цикл итераций
M32:
    N=N++;
    for( i=0; i<6; i++ )
        {X[i][10]=X[i][9]; X[i][1]=X[i][0]+X[i][10];
        X[i][3]=X[i][1]+X[i][2]; }
    X[0][4]=X[0][3]*(1-px[1]); X[1][4]=X[1][3]-
    X[0][3]*px[1]*(0.5*px[2]+1-px[2]);
    X[2][4]=X[2][3]; X[3][4]=X[3][3]+X[0][3]*px[1]*(px[2]+(1-
    px[2])*2);
    X[4][4]=X[4][3]+X[0][3]*px[1]*px[2];
    X[5][4]=X[5][3]+X[0][3]*px[1]*(1-px[2]);
    X[1][7]=X[1][4]; X[2][7]=X[2][4]; X[5][7]=X[5][4];
    X[3][7]=0.02*(X[1][7]+X[2][7]+X[5][7]); X[0][6]=X[0][4];
    X[4][6]=X[4][4];
    X[3][6]=2.96*X[4][6]; X[3][5]=X[3][6]-X[3][4]+X[3][7];
    for( i=0; i<6; i++ )
        { X[i][8]=X[i][7]*DS; X[i][9]=X[i][7]-X[i][8]; }

// Проверка сходимости результатов
    if( X[0][9] != X[0][10] || X[1][9] != X[1][10] || X[2][9] !=
X[2][10] || X[3][9] != X[3][10] || X[4][9] != X[4][10] || X[5][9]
!= X[5][10] ) goto M32; S[7]=0;
    for( i=0; i<6; i++ )
        S[7]=X[i][3]+S[7];
    SUM1=S[7]; Ck[1]=X[1][3]/SUM1;
    if( fabs(Cz[1]-Ck[1]) > 0.0001 ) goto M33;
    Prov=2; goto M25;
//Выход на заданную концентрацию воды
M23:
    if( px[5] > (CkM[2]+0.03) )
        Print_cx( rezcx, DS, DR, CkM, px, 4, WW1, WW2, WW3, WW4, WW5, WW6, Nu, Y_,
        A0, A1, A2, A12);
    else ;
    Q[2]=1;
//Выход на заданную производительность
    Prov=3;
    PP=(X[0][6]*32+X[3][6]*18+X[4][6]*30)*0.008;
    for( i=0; i<6; i++ )
        for( j=0; j<11; j++ ) X[i][j]=X[i][j]*px[0]/PP;
    N=N++;

M25:
//Расчет концентраций на входе в реактор
    sprintf( s[0],f[0],N );
    TW_SavW(0); CF_FDsp(&MSG5_C,27,10);
    CF_FPut( &MSG5_C, 0, (char *)s[0] );
    sleep(1); TW_RstW(0);

    S[8]=0;
    for( i=0; i<6; i++ ) S[8]=X[i][3]+S[8]; SUM1=S[8];

```

```

Ck[0]=X[0][3]/SUM1; Ck[1]=X[1][3]/SUM1; Ck[2]=X[3][3]/SUM1;
CkM[0]=Ck[0]*44.6; CkM[1]=Ck[1]*44.6; CkM[2]=Ck[2]*44.6;

if( Q[0]==0 ) goto M21;
if( Q[1]==0 ) goto M22;
if( Q[2]==0 ) goto M23;

PP=(X[0][6]*32+X[3][6]*18+X[4][6]*30)*0.008;
X[4][6]=X[4][4];

WW1[11]=X[0][0];      WW1[1]=X[0][1];      WW1[2]=X[0][2];
WW1[3]=X[0][3];      WW1[4]=X[0][4];      WW1[5]=X[0][5];
WW2[11]=X[1][0];      WW2[1]=X[1][1];      WW2[2]=X[1][2];
WW2[3]=X[1][3];      WW2[4]=X[1][4];      WW2[5]=X[1][5];

WW3[11]=X[2][0];      WW3[1]=X[2][1];      WW3[2]=X[2][2];
WW3[3]=X[2][3];      WW3[4]=X[2][4];      WW3[5]=X[2][5];

WW4[11]=X[3][0];      WW4[1]=X[3][1];      WW4[2]=X[3][2];
WW4[3]=X[3][3];      WW4[4]=X[3][4];      WW4[5]=X[3][5];

WW5[11]=X[4][0];      WW5[1]=X[4][1];      WW5[2]=X[4][2];
WW5[3]=X[4][3];      WW5[4]=X[4][4];      WW5[5]=X[4][5];

WW6[11]=X[5][0];      WW6[1]=X[5][1];      WW6[2]=X[5][2];
WW6[3]=X[5][3];      WW6[4]=X[5][4];      WW6[5]=X[5][5];

WW1[6]=X[0][6];      WW1[7]=X[0][7];      WW1[8]=X[0][8];
WW1[9]=X[0][9];      WW1[10]=X[0][10];

WW2[6]=X[1][6];      WW2[7]=X[1][7];      WW2[8]=X[1][8];
WW2[9]=X[1][9];      WW2[10]=X[1][10];

WW3[6]=X[2][6];      WW3[7]=X[2][7];      WW3[8]=X[2][8];
WW3[9]=X[2][9];      WW3[10]=X[2][10];

WW4[6]=X[3][6];      WW4[7]=X[3][7];      WW4[8]=X[3][8];
WW4[9]=X[3][9];      WW4[10]=X[3][10];

WW5[6]=X[4][6];      WW5[7]=X[4][7];      WW5[8]=X[4][8];
WW5[9]=X[4][9];      WW5[10]=X[4][10];      WW5[6]=X[5][6];

WW6[7]=X[5][7];      WW6[8]=X[5][8];      WW6[9]=X[5][9];
WW6[10]=X[5][10];

if (ZuKa == 0)
{px[3] = Metanol + DelTa;
px[4] = KisLorod + DelTa;
Print_cx(rezcx, DS, DR, CkM, px, 1, WW1, WW2, WW3, WW4, WW5, WW6, Nu, Y_, A0, A1,
A2, A12);
BotMsg("  Вариантный расчет.", "  Вариант 1  + + ");};

```

```

if (ZuKa == 1)
{Print_cx(
rezcx, DS, DR, CkM, px, 2, WW1, WW2, WW3, WW4, WW5, WW6, Nu, Y_, A0, A1, A2, A12);
px[3] = Metanol - DelTa;
px[4] = KisLorod + DelTa;
BotMsg("      Вариантный расчет.", "      Вариант 2  - + "); };

if (ZuKa == 2)
{Print_cx(
rezcx, DS, DR, CkM, px, 2, WW1, WW2, WW3, WW4, WW5, WW6, Nu, Y_, A0, A1, A2, A12);
px[3] = Metanol + DelTa; px[4] = KisLorod - DelTa;
BotMsg("  Вариантный расчет.", "  Вариант 3  + - "); };

if (ZuKa == 3)
{Print_cx(
rezcx, DS, DR, CkM, px, 2, WW1, WW2, WW3, WW4, WW5, WW6, Nu, Y_, A0, A1, A2, A12);
px[3] = Metanol - DelTa; px[4] = KisLorod - DelTa;
BotMsg("      Вариантный расчет.", "      Вариант 4  - - "); };

if (ZuKa == 4)
{Print_cx(
rezcx, DS, DR, CkM, px, 2, WW1, WW2, WW3, WW4, WW5, WW6, Nu, Y_, A0, A1, A2, A12);
};

  ZuKa = ZuKa + 1; Nu = ZuKa;

// Сдувка
SummY51_ = WW1[8] + WW2[8] + WW3[8] + WW4[8] + WW5[8] + WW6[8];
// Рецикл
SummY52_ = WW1[9] + WW2[9] + WW3[9] + WW4[9] + WW5[9] + WW6[9];

Y_[Nu-1] = 5 * SummY51_ + SummY52_;

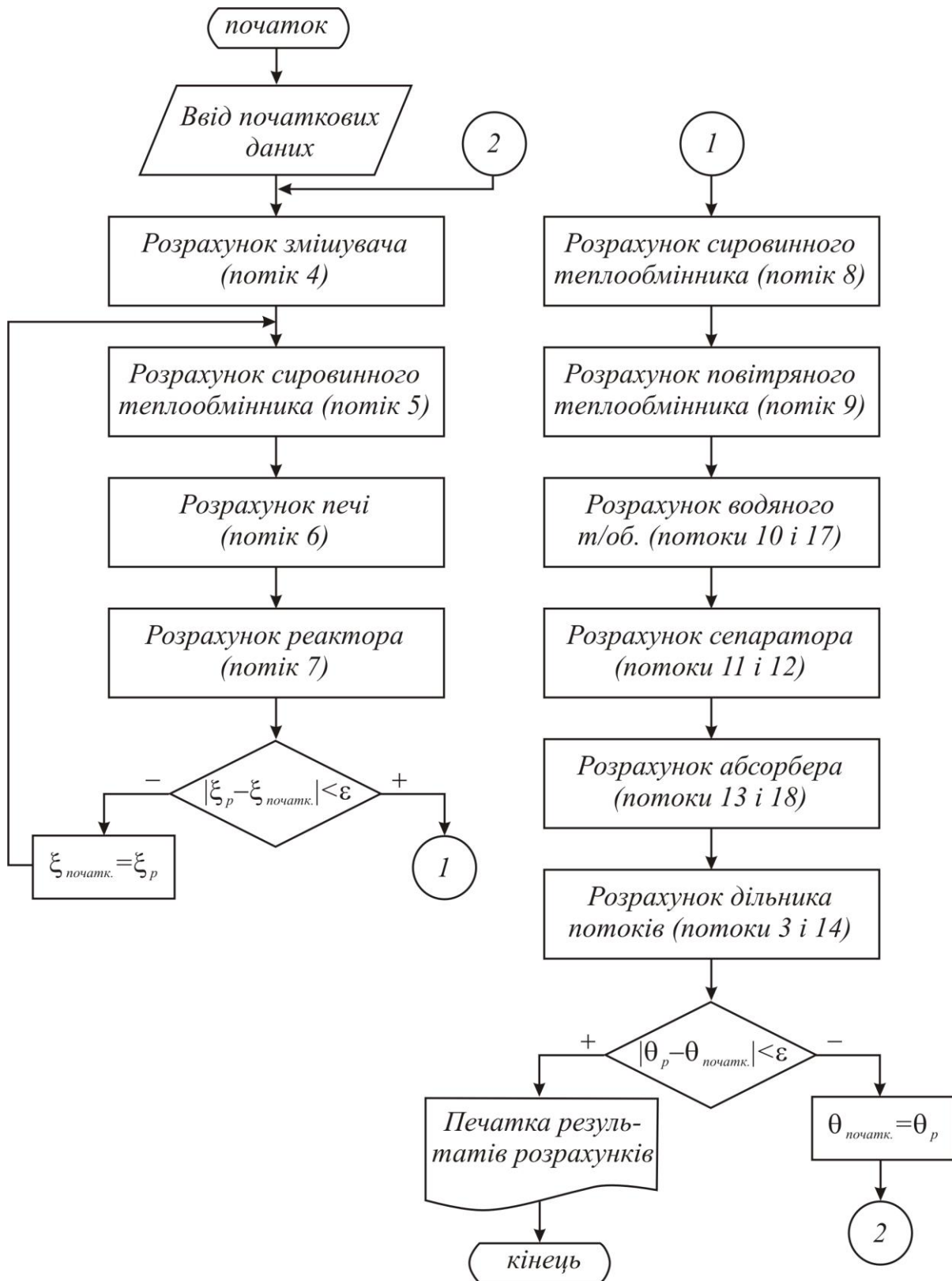
if (ZuKa > 4) goto Metochka; else goto PyatjRaz;

Metochka:
Print_cx(
rezcx, DS, DR, CkM, px, 3, WW1, WW2, WW3, WW4, WW5, WW6, Nu, Y_, A0, A1, A2, A12);
px[3] = Metanol; px[4] = KisLorod; DS = DelTa;
Print_cx(rezcx, DS, DR, CkM, px, 7, WW1, WW2, WW3, WW4, WW5, WW6, Nu-1, Y_, A0,
A1, A2, A12);

fclose(rezcx);
return 0;
}

```

Блок-схема програмного комплексу «GIDRA.EXE»



Лістинг програмного комплексу «GIDRA.EXE»

```

/* ОБІАВ.Н */
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <conio.h>
#include <stdlib.h>

int infput (void);
void smes (void);
void tobmen (void);
void tnagr (void);
void reaktor (void);
void wtobmen (void);
void separat (void);
void absr (void);
void delit (void);
void print (void);

/* INPUT.C */
#include <stdio.h>
#include <conio.h>
#include <math.h>

extern int i, j;
extern float a[18][10];
float nx;
char *naz, *per[13];
void podpr(void);
void inperr(void);

int infput(void)
{
per[0]="Расход сырья на входе в систему"; /* 71000-75000 */
per[1]=" в т.ч. дизельное топливо";
per[2]=" в т.ч. сернистые соединения"; /* 64-75 */
per[3]="Температура потока"; /* 51-60 */
per[4]="Расход водородсодержащего газа"; /* 345-780 */
per[5]=" в т.ч. водород"; /* 35-80% */
per[6]=" в т.ч. углеводороды (парафины)"; /* 65-20% */
per[7]=" в т.ч. сероводород"; /* 0-0,2% */
per[8]="Расход абсорбента"; /* 6500-15000 */
per[9]=" в т.ч. сероводород"; /* 0-0.25% */
per[10]=" в т.ч. р-р МЭА"; /* 100-99.75% */
per[11]="Расход охлаждающей воды"; /*60000-65000*/
per[12]="Начальная температура охлаждающей воды";
/* 15-25 */

/* Загрузка новых расходов */
/* Загрузка расхода сырья (поток 1) */
i1: clrscr();
i=0; naz=per[0]; j=8; podpr();

```

```

/* Расход сырья на входе в систему */
i=0; naz=per[1]; j=5; podpr();
/* в т.ч. дизельное топливо */
i=0; naz=per[2]; j=3; podpr();
/* в т.ч. сернистые соединения */
if(fabs((a[0][8]-a[0][3]-a[0][5])/(a[0][8]+0.0001))>0.001)
{
    inperr();
    goto i1;
    /* -> i1 */
}
/* Загрузка температуры сырья (поток 1) */
naz=per[3]; j=9; podpr(); /* Температура потока */
/* Загрузка расхода водородсодержащего газа (поток 2) */
i2:
    i=1;
    naz=per[4]; j=8; podpr(); /* Расход водородсодержащего газа */
    naz=per[5]; j=0; podpr(); /* в т.ч. водород */
    naz=per[6]; j=1; podpr(); /* в т.ч. углеводороды (парафины) */
    naz=per[7]; j=2; podpr(); /* в т.ч. сероводород */
    if(fabs((a[1][8]-a[1][0]-a[1][1]-
a[1][2])/(a[1][8]+0.0001))>0.001)
    {
        inperr();
        goto i2;
        /* -> i2 */
    }
/* Загрузка расхода абсорбента (поток 18) */
i3:
    i=17;
    naz=per[8]; j=8; podpr(); /* Расход абсорбента */
    naz=per[9]; j=2; podpr(); /* в т.ч. сероводород */
    naz=per[10]; j=7; podpr(); /* в т.ч. р-р МЭА */
    if(fabs((a[14][8]-a[14][7]-a[14][2])/(a[14][8]+0.0001))>0.001)
    {
        inperr();
        goto i3;
        /* -> i3 */
    }
/* Загрузка расхода охлаждающей воды (поток 16) */
i=15;
naz=per[11]; j=8; podpr(); a[15][6]=a[15][8];
/* Загрузка температуры охлаждающей воды (поток 16) */
naz=per[12]; j=9; podpr();
printf("Для начала расчета нажмите любую клавишу.");
getch();
return(0);
}

void podpr(void)
{
    extern int i, j;

```

```

extern float nx, a[18][10];
printf("\n%s",naz);
printf(": %.2f",a[i][j]);
printf("\nВведите новое значение.");
printf("\nЕсли поток не изменяется, введите '0': ");
scanf("%f",&nx);
if(nx>0) a[i][j]=nx;
printf("\nНовое значение: a[%d][%d]=%.2f\n\n",i,j,a[i][j]);
}

void inperr(void)
{
printf("\nСумма расходов компонентов отличается от суммарного
расхода более, чем на 1%%.");
printf("\nПопробуйте ещё раз. Нажмите любую клавишу.");
getch();
}

/* ABSR.C */
#include <stdio.h>

extern int i, j;
extern float bx[10], absb[10], absx[10], px[10];
extern float b, dt;
/* b - степень абсорбции */
/* dt - разность температур на входе и выходе абсорбера */

void absr(void)
{
for(i=0;i<2;i++)
{
absx[i]=absb[i];          /* Все расходы, кроме H2S, не меняются */
px[i]=bx[i];
}
px[2]=(1-b)*bx[2];       /* Расход H2S потока 13 */
absx[2]=b*bx[2]+absb[2]; /* Расход H2S потока 15 */
for(i=3;i<8;i++)
{
absx[i]=absb[i];          /* Все расходы, кроме H2S, не меняются */
px[i]=bx[i];
}
for(i=0;i<8;i++)
{
px[8]+=px[i];            /* Расчет суммарного расхода потока 13 */
absx[8]+=absx[i];        /* Расчет суммарного расхода потока 15 */
}
px[9]=bx[9]-dt;          /* Расчет температуры потока 13 */
absx[9]=absb[9]+dt;      /* Расчет температуры потока 15 */
}

/* DELIT.C */
#include <stdio.h>

```

```

extern int i, j;
extern float bx[10], a[18][10], px2[10], px1[10], d;
/* d - коэффициент деления потоков */

void delit(void)
{
for(i=0;i<9;i++)
{
px1[i]=d*bx[i];          /* Расчет расходов потока 3 */
px2[i]=(1-d)*bx[i];     /* Расчет расходов потока 14 */
}
px1[9]=bx[9];          /* Температуры в делителе не меняются */
px2[9]=bx[9];
}

```

/* РЕАКТОР.С */

```
#include <stdio.h>
```

```

extern int i, j;
extern float bx[10], px[10], r[8];
extern float x, p;

```

```

void реактор(void)
{
for(i=0;i<8;i++)
{
px[i]=bx[i]+r[i]*x*bx[3];
px[8]+=px[i];
}
px[9]=p*bx[9];
}

```

/* SEPARAT.C */

```
#include <stdio.h>
```

```

extern int i, j;
extern float bx[10], pxg[10], pxw[10];
extern float s1[6][4];

```

```

void separat(void)
{
for(i=0;i<10;i++)
pxg[i]=0;          /* Обнулить параметры потока 11 */
                    /* Расчет расходов в газ. фазе (поток 11) */

for(i=0;i<6;i++)
pxg[i]=s1[i][0]*bx[i]+s1[i][1]*bx[5]+s1[i][2]*bx[9]+s1[i][3];
/* Расчет расходов компонентов потока 12, */
/* суммарных расходов и температур потоков 11 и 12 */
pxg[8]=0;          /* Обнулить суммарный расход потока 11 */
for(i=0;i<6;i++)
{
pxg[8]+=pxg[i];    /* Суммарный расход потока 11 */
}
}

```

```

pxw[i]=bx[i]-pxg[i];/* Расходы компонентов потока 12 */
}
pxw[8]=bx[8]-pxg[8];/* Суммарный расход потока 12 */
pxg[9]=bx[9];      /* Температура потока 11 = T10 */
pxw[9]=bx[9];      /* Температура потока 12 = T10 */
}

```

/* SMES.C */

```
#include <stdio.h>
```

```
extern int i, j;
extern float f[4][10], c[3][2];
```

```
void smes(void)
{
    for(j=0;j<9;j++)
        for(i=0;i<3;i++)
            f[3][j]+=f[i][j];
    for(i=0;i<3;i++) f[3][9]+=c[i][0]*f[i][9]+c[i][1]*f[i][8];
}

```

/* TNAGR.C */

```
#include <stdio.h>
```

```
extern int i, j;
extern float bx[10], zn[3], px[10];
extern float q;
```

```
void tnagr(void)
{
    for(i=0;i<9;i++)
        /* Расходы выходного и входного потоков равны */
        px[i]=bx[i];
    /* Температура выходного потока */
    px[9]=bx[9]+zn[0]*bx[8]+zn[1]+zn[2]*q;
}

```

/* TOBMEN.C */

```
#include <stdio.h>
```

```
extern int i, j;
extern float bx[10], tp[10], px[10], z[6];
extern float k, v, n;
```

```
void tobmen(void)
{
    px[9]=z[0]*bx[9]+z[1]*bx[8]+z[2]*tp[9]+z[3]*tp[8]+z[4]+z[5]*k*v*n;
}

```

/* WTOBMEN.C */

```
#include <stdio.h>
```

```

extern int i, j;
extern float bx[10], px[10], wodb[10], wodx[10], w1[5], w2[5];
extern float k2, f2, n2;

void wtobmen(void)
{
    for(i=0;i<9;i++)
    {
        px[i]=bx[i];
        wodx[i]=wodb[i];
    }
px[9]=w1[0]*bx[9]+w1[1]*bx[8]+w1[2]*wodb[9]+w1[3]*wodb[8]+w1[4]*k2
*f2*n2;

wodx[9]=w2[0]*bx[9]+w2[1]*bx[8]+w2[2]*wodb[9]+w2[3]*wodb[8]+w2[4]*
k2*f2*n2;
}

/* PRINT.C */
#include <stdio.h>

extern int i, j;
extern float a[18][10];

void print(void)
{
FILE *rez_data;
rez_data=fopen("gidra.rez", "a");
/* Открыть файл "gidra.rez" для записи */
fprintf(rez_data, "\n");
fprintf(rez_data, "Поток| Расходы \n");
fprintf(rez_data, " № | H2 | углеводов| H2S | S
| Бензин \n");
for(i=0;i<18;i++)
{
    fprintf(rez_data, " %2d", i+1);
    for(j=0;j<5;j++)
fprintf(rez_data, " %10.2f", a[i][j]);
fprintf(rez_data, "\n");
}
    fprintf(rez_data, "\n");
    fprintf(rez_data, "\n");
fprintf(rez_data, "Поток| Расходы |Температура\n");
fprintf(rez_data, " № | ДТ | H2O | МЭА |
суммарный | потока\n");
for(i=0;i<18;i++)
{
    fprintf(rez_data, " %2d", i+1);
    for(j=5;j<10;j++)
fprintf(rez_data, " %10.2f", a[i][j]);
fprintf(rez_data, "\n");
}
}

```

```

    }
    fclose(rez_data);
}

```

/* GIDRA.C */

```

#include <stdio.h>
#include <conio.h>
#include "obiav.h"

```

```

int i, j;
float tochn=0.001;
float a[18][10];
float b1[6]={0.2, -3e-4, 0.73, 0, -54.1, 4.99e-4};
float b2[6]={0.62, 0, 0.21, 8e-4, 48.55, -5.39e-4};
float c[3][2]={{0.91, -2.9e-6},{0.082, -5e-6},{6e-3, 5.5e-5}};
float tn1[3]={-1.1e-3, 90.4, 1.04e-2};
float tn2[3]={9.67e-4, -79.35, -0.017};
float w1[5]={0.65, 1.4e-5, 0.325, -2.5e-4, 1.47e-4};
float w2[5]={0.27, 2.5e-5, 0.73, -1.4e-4, 2.15e-4};
float s1[6][4]=

```

```

{
    {1, -1e-4, -7e-3, -4},{1, -6e-3, 10.625, -751},{1, -9e-5,
    0.14, -10.93},
    {0, -1.6e-5, 0.04, 1},{1, -8.58e-4, 2.59, -1450},{0, -5e-3,
    -0.157, 550}
};

```

```

float r[8]={-2.894, 8.248, 1, -1, 22.209, -27.563, 0, 0};
float b=0.994, p=1.024, dt=5, d=0.96, k1=218.6, k2=216;
float f1=221, f2=200, n1=3, n2=2, q1=8722.5, q2=4652,
x=0.813;
float k, v, n, q;
float bx[10], px[10], px1[10], px2[10], pxg[10], pxw[10],
wodb[10], wodx[10];
float absb[10], absx[10], tp[10], z[6], zn[3], f[4][10];

```

```

void main(void)

```

```

{
    for(i=0;i<18;i++)
        for(j=0;j<10;j++)
            a[i][j]=0;
    a[0][3]=75;      a[0][5]=74925;    a[0][9]=55;
    a[1][0]=275.0;  a[1][1]=244.5;    a[1][2]=0.5;    a[1][9]=50;
    a[2][0]=1983;   a[2][1]=2906.1;   a[2][2]=0.3;    a[2][3]=1.8;
    a[2][4]=203.8;  a[2][5]=168;      a[2][9]=47;
    a[6][0]=2077.3; a[6][1]=3665.6;   a[6][2]=63.2;   a[6][3]=14.4;
    a[6][4]=1590.5; a[6][5]=73372.0; a[6][9]=394;
    a[17][2]=15;    a[17][7]=9985;    a[17][9]=40;
    a[15][6]=65000; a[15][9]=25;
    for(i=0;i<18;i++)
        {
            a[i][8]=0;

```

```

        for(j=0;j<8;j++)
            a[i][8]+=a[i][j];
    }
    if(infput(>0)
        abort();
    clrscr();
/* ----- Расчет смесителя (потока 4) ----- */
    m1:
for(i=0;i<3;i++)
for(j=0;j<10;j++) /* Чтение параметров вход. потоков 1, 2, 3 */
f[i][j]=a[i][j]; /* из элементов массива a[0...2][0...9] */
for(j=0;j<10;j++)
f[3][j]=0; /* Обнуление параметров выходящего потока 4 */
    smes();
        for(j=0;j<10;j++)
            {
                if(f[3][j]<0)
                    {
                        printf("\na[3][%d]<0\n",j);
                        goto m3;
                    }
            }
a[3][j]=f[3][j];
/*Сохранение параметров выход. потока 4 в a[3][i] */
}
/* ----- Расчет сырьевого теплообменника (потока 5) ----- */
    m2:;
        for(j=0;j<10;j++)
            {
bx[j]=a[3][j]; /* Задание параметров входящего потока 4 */
tp[j]=a[6][j]; /* Задание параметров входящего потока 7 */
            }
for(j=0;j<9;j++)
px[j]=a[3][j]; /* Расходы потока 5 как у потока 4 */
for(j=0;j<6;j++)
z[j]=b1[j]; /* Коэффициенты уравнения расчета T5 */
k=k1; /* Коэффициент теплопередачи сырьевого теплообменника k1 */
v=f1; /* Поверхность теплообмена сырьевого теплообменника F1*/
n=n1; /* Число сырьевых теплообменников */
    tobmen();
        for(j=0;j<10;j++)
            {
                if(px[j]<0)
                    {
                        printf("\na[4][%d]<0\n",j);
                        goto m3;
                    }
            }
a[4][j]=px[j];
/* Сохранение параметров выход. потока 5 в a[4][i] */
}
/* ----- Расчет печи (потока 6) ----- */
        for(i=0;i<10;i++)
            {

```



```

bx[i]=a[4][i];      /* Задание параметров входящего потока 5 */
px[i]=0;           /* Обнуление параметров выходящего потока 6 */
}
for(i=0;i<3;i++)
zn[i]=tn1[i];      /* Коэффициенты уравнения расчета Твых */
q=q1;              /* Тепловая нагрузка печи qp */
  tnagr();
  for(i=0;i<10;i++)
  {
    if(px[i]<0)
    {
      printf("\na[5][%d]<0\n",i);
      goto m3;
    }
a[5][i]=px[i];
/* Сохранение параметров выходящего потока 6 в a[5][i] */
}
/* ----- Расчет реактора (потока 7) ----- */
  for(i=0;i<10;i++)
  {
bx[i]=a[5][i];      /* Задание параметров входящего потока 6 */
px[i]=0;           /* Обнуление параметров выходящего потока 7 */
}
  реактор();

/* ----- Итерационный блок расчета потока 7 ----- */
  for(i=0;i<10;i++)
  {
    if(px[i]<0)
    {
      printf("\na[6][%d]<0\n",i);
      goto m3;
    }
    if(fabs((px[i]-a[6][i])/(px[i]+1e-4))>tochn)
    {
      for(i=0;i<10;i++)
a[6][i]=px[i];
/* Сохранение параметров потока 7 в a[6][i] */
      goto m2;
}
/* -> m2 */
}
/* Если хотя бы один расчетный параметр потока 7 отличается от
исходного приближения в пределах заданной точности, то
за исходное приближение параметров потока 7 берутся расчетные
и расчет повторяется от метки m2. */
}
/* ----- Расчет сырьевого теплообменника (поток 8) ----- */
  for(i=0;i<10;i++)
  {
bx[i]=a[3][i];      /* Задание параметров входящего потока 4 */
tp[i]=a[6][i];      /* Задание параметров входящего потока 7 */
px[i]=0;           /* Обнуление параметров выходящего потока 8 */

```

```

    }
    for(j=0;j<9;j++)
px[j]=a[6][j]; /* Расходы потока 8 как у потока 7 */
    for(i=0;i<6;i++)
z[i]=b2[i]; /* Коэффициенты уравнения расчета Т8 */
    tobmen();
    for(i=0;i<10;i++)
    {
        if(px[i]<0)
        {
            printf("\na[7][%d]<0\n",i);
            goto m3;
        }
a[7][i]=px[i];
/* Сохранение параметров выход. потока 8 в a[7][i] */
    }
/* ----- Расчет воздушного теплообменника (потока 9) ----- */
    for(i=0;i<10;i++)
    {
bx[i]=a[7][i]; /* Задание параметров входящего потока 8 */
px[i]=0; /* Обнуление параметров выходящего потока 9 */
    }
    for(i=0;i<3;i++)
zn[i]=tn2[i]; /* Коэффициенты уравнения расчета Твых */
q=q2;
/* Тепловая нагрузка воздуш. теплообменника qx */
    tnagr();
    for(i=0;i<10;i++)
    {
        if(px[i]<0)
        {
            printf("\na[8][%d]<0\n",i);
            goto m3;
        }
a[8][i]=px[i];
/* Сохранение параметров выход. потока 9 в a[8][i] */
    }
/* ----- Расчет водяного теплообменника (потоки 10 и 17) --- */
    for(i=0;i<10;i++)
    {
bx[i]=a[8][i]; /* Задание параметров входящего потока 9 */
px[i]=0; /* Обнуление параметров выходящего потока 10 */
wodb[i]=a[15][i];
/* Задание параметров вход. потока охл. воды 16 */
wodx[i]=0; /* Обнуление параметров выход. потока охл. воды 17 */
    }
    wtobmen();
    for(i=0;i<10;i++)
    {
        if(px[i]<0)
        {
            printf("\na[9][%d]<0\n",i);

```

```

        goto m3;
    }
    if(wodx[i]<0)
    {
        printf("\na[16][%d]<0\n",i);
        goto m3;
    }
a[9][i]=px[i];
/* Сохранение параметров вых. потока 10 в a[9][i] */
a[16][i]=wodx[i];
/* Сохранение параметров вых. потока 17 в a[16][i] */
}
/* ----- Расчет сепаратора (потоки 11 и 12) ----- */
for(i=0;i<10;i++)
{
bx[i]=a[9][i];      /* Задание параметров вход. потока 10 */
pxg[i]=0;          /* Обнуление параметров выход. потока 11 */
pxw[i]=0;          /* Обнуление параметров выход. потока 12 */
}
separat();
for(i=0;i<10;i++)
{
    if(pxg[i]<0)
    {
        printf("\na[10][%d]<0\n",i);
        goto m3;
    }
    if(pxw[i]<0)
    {
        printf("\na[11][%d]<0\n",i);
        goto m3;
    }
}
a[10][i]=pxg[i];
/* Сохранение параметров вых. потока 11 в a[10][i] */
a[11][i]=pxw[i];
/* Сохранение параметров вых. потока 12 в a[11][i] */
}
/* ----- Расчет абсорбера (потоки 13 и 18) ----- */
for(i=0;i<10;i++)
{
bx[i]=a[10][i];    /* Задание параметров вход. потока 11 */
px[i]=0;          /* Обнуление параметров выход. потока 13 */
absb[i]=a[17][i]; /* Задание параметров вход. потока 18 */
absx[i]=0;        /* Обнуление параметров выход. потока 15 */
}
absr();
for(i=0;i<10;i++)
{
    if(px[i]<0)
    {
        printf("\na[12][%d]<0\n",i);
        goto m3;
    }
}

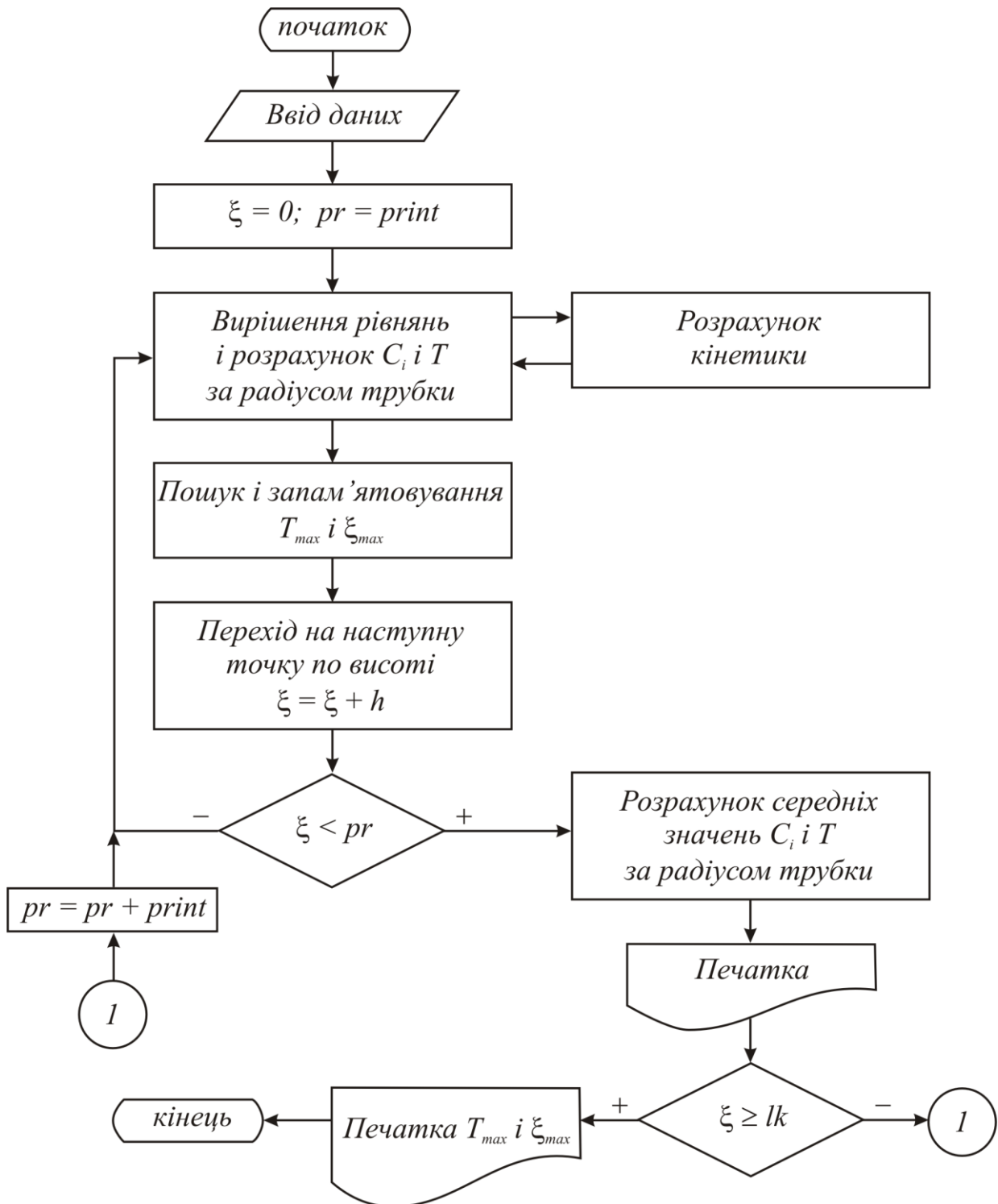
```

```

    }
    if(absx[i]<0)
    {
        printf("\na[14][%d]<0\n",i);
        goto m3;
    }
a[12][i]=px[i];
/* Сохранение параметров вых. потока 13 в a[12][i] */
a[14][i]=absx[i];
/* Сохранение параметров вых. потока 15 в a[14][i] */
}
/* ----- Расчет делителя потоков (потоки 3 и 14) ----- */
for(i=0;i<10;i++)
{
bx[i]=a[12][i]; /* Задание параметров вход. потока 13 */
px1[i]=0; /* Обнуление параметров выход. потока 3 */
px2[i]=0; /* Обнуление параметров выход. потока 14 */
}
delit();
for(i=0;i<10;i++)
{
    if(px2[i]<0)
    {
        printf("\na[13][%d]<0\n",i);
        goto m3;
    }
}
a[13][i]=px2[i];
/* Сохранение параметров вых. потока 14 в a[13][i] */
}
/* ----- Итерационный блок расчета потока 3 ----- */
for(i=0;i<10;i++)
{
    if(px1[i]<0)
    {
        printf("\na[2][%d]<0\n",i);
        goto m3;
    }
    if(fabs((a[2][i]-px1[i])/(px1[i]+1e-4))>tochn)
    {
        for(i=0;i<10;i++)
a[2][i]=px1[i]; /* Сохранение параметров потока 3 в a[2][i] */
        goto m1; /* -> m1 */
    }
}
/* Если хотя бы один расчетный параметр потока 3 отличается от
исходного приближения в пределах заданной точности, то за
исходное приближение параметров потока 3 берутся расчетные
и расчет повторяется от метки m1. */
}
/* ----- Запись результатов в файл ----- */
print();
m3:;
}

```

Блок-схема програми «COMPLEX. Трубчастий реактор»



lk – довжина шару каталізатора в трубках;

ξ, h – поточна координата і крок по довжині шару;

$print$ – частота печатки по довжині трубки;

T_{max}, ξ_{max} – максимальна температура і її координата в шарі каталізатора;

C_i, T – концентрація речовин і температура в шарі каталізатора

Лістинг розрахункового модуля програми «COMPLEX. Трубчастий реактор»

```

#include "complex.hpp"

/* Функция расчета трубчатого реактора получения формальдегида из
метанола */
/* Железо-молибденовый катализатор цилиндрической формы */
/* Учебный вариант - задается только два значения TXL */

/*      t5[12]  - массив начальных значений: */
/*      t5[0]   - температура хладоагента 1,      град С */
/*      t5[1]   - температура хладоагента 2,      град С */
/*      t5[2]   - концентрация метанола на входе,  моль/куб.м */
/*      t5[3]   - - " - формальдегида на входе,   моль/куб.м */
/*      t5[4]   - - " - паров воды на входе,      моль/куб.м */
/*      t5[5]   - - " - кислорода на входе,       моль/куб.м */
/*      t5[6]   - температура на входе в трубку,  град С */
/*      t5[8]   - радиус трубки,                  м */
/*      t5[7]   - диаметр зерна,                  м */
/*      t5[9]   - длина трубки,                  м */
/*      t5[10]  - пористость слоя,                 доли */
/*      t5[11]  - линейная скорость газа,        м/с */
/*      n1     - число шагов по длине трубки */

void kintr ( float T, float Cp, float *C, float *Ff, float *Aa,
float *KO, float *EN )
{
    int      k;
    float    Q1, Q2, T1, RR, W1, W2, W21, W22, WM, WK, WF, WW;
    float    K1[11];

    Q1= 38.2; Q2=55.1; RR=1.987; T1=T*RR;
    for( k=0; k<11; k++ ) { K1[k]=KO[k]*exp(EN[k]/T1); }
    W1=K1[0]*C[0]/(1 + K1[2]*C[0] + K1[3]*C[2] + K1[4]*C[0]/C[3]);
    W21=K1[1]*pow( C[1], 0.75 )/(1 + K1[5]*C[0] + K1[6]*C[2] +
K1[7]*C[1]/C[3]);
    W22=K1[8]*C[0]/(1 + K1[9]*C[2] + K1[10]*C[0]/C[3]);
    W2=W21+W22; WM=-W1; WF=W1-W2; WW=W1+W2; WK=- (W1+W2)/2;
    Ff[0]=Aa[4]*Cp*T + Aa[2]*((Q1*W1)+(Q2*W2));
    Ff[1]=(C[0]*Aa[3])+(Aa[1]*WM);      Ff[2]=(C[1]*Aa[3])+(Aa[1]*WF);
    Ff[3]=(C[2]*Aa[3])+(Aa[1]*WW); Ff[4]=(C[3]*Aa[3])+(Aa[1]*WK);
}

/*-----*/

int trubka ( float *t5 )
{
    int      l, j, i, z, k, n1, n2, n, n7, m, m2, MN, NM, Shet ;
    float    Tx11, Cp, Mtgt, Prin, DR, UEN, UER, UR, PRN, DE ;
    float    REN, REN1, RENR, LR, NU, KT, FE, G1, ASS, DP1, RD;
    float    E11, LA, PR, POK, H, H1, TX, T ;
}

```

```

float      RCC,E,E1,E2,DT1=0.0,DL,DP,TAUK,KMT=0.0 ;

float      O[101], D[101], YR[900]          ;
float      B[5], F[5], Ff[5], Aa[5], C[4]   ;
float      SM[10], SM1[10], SM2[10]        ;
float      KO[11], EN[11]                  ;
float      Se[5][11], Sk[5][11]            ;
float      Cc[101][7], P[101][5], Q[101][5];
FILE      *reztr                            ;

if( t5[0]<200  || t5[0]>320  ) return  1;
if( t5[1]<200  || t5[1]>320  ) return  2;
if( t5[2]<=0   ) return  3;
if( t5[3]<0   ) return  4;
if( t5[4]<=0   ) return  5;
if( t5[5]<=0   ) return  6;
if( t5[6]<150  || t5[6]>230  ) return  7;
if( t5[7]<0.002 || t5[7]>0.0065) return  8;
if( t5[8]<0.005 || t5[8]>0.02 ) return  9;
if( t5[9]<0.005 || t5[9]>5     ) return 10;
if( t5[10]<0.3  || t5[10]>0.8  ) return 11;
if( t5[11]<0.7  || t5[11]>3    ) return 12;

n1=t5[9]*200; n=6; n7=2;
/*      ЗАДАНИЕ НАЧАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ      */
if( ( reztr=fopen("trubka.out","w") ) != NULL )
{
  BotMsg("Производится расчет.", "Ждите...");
  for( l=0; l<n7; l++ )
  {
    Tx1l=t5[l]; Cp=0.33; Mtgt=500.0; Prin=0.05;
    m2=1; m=4+m2; n2=n+1;

/* РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТОВ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ТЕПЛОПЕРЕДАЧИ */
    DR=t5[11]*t5[7]/11; UEN=t5[11]/t5[10]; UER=UEN*573/273;
    UR=t5[11]*573/273; PRN=0.735; DE=4*t5[10]*t5[7]/6/(1-t5[10]);
    REN=UEN*DE/1.338e-05; LR=5.69e-06*(10 + 0.11*REN*PRN);
    RENR=UER*DE/4.833e-05; REN1=pow( RENR, 0.8 );
    NU=0.09*REN1*0.903; KT=NU*0.0000101/DE;

/* РАСЧЕТ ГИДРАВЛИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ ТРУБКИ      */
    FE=38.4/RENR + 0.585; ASS=6*(1-t5[10])/t5[7];
    G1=ASS/2/9.81/pow( t5[10], 3);
    DP1=pow( UR, 2 )*0.615*FE*G1*1.013e-05;

/* КОНСТАНТЫ СКОРОСТЕЙ РЕАКЦИЙ ДЛЯ РАЗНЫХ ЗЕРЕН КАТАЛИЗАТОРА */
    Sk[0][0] = 12430.0 ; Sk[0][1] = 106.0   ; Sk[0][2] = 8.906e-06;
    Sk[0][3] = 0.0002406; Sk[0][4] = 311.0   ; Sk[0][5] = 1.47E-11 ;
    Sk[0][6] = 0.000108 ; Sk[0][7] = 108550.0; Sk[0][8] = 0.0166   ;
    Sk[0][9] = 2.68e-09 ; Sk[0][10] = 0.000976 ;

/*      Зерно катализатора 6*6 мм      */

```

```

Sk[1][0] = 13800.0 ; Sk[1][1] = 96.2 ; Sk[1][2] = 1.109e-05;
Sk[1][3] = 3.694e-05; Sk[1][4] = 175.4 ; Sk[1][5] = 4.78e-11 ;
Sk[1][6] = 0.0000975; Sk[1][7] = 110000.0; Sk[1][8] = 0.0438 ;
Sk[1][9] = 2.68e-09 ; Sk[1][10] = 0.000976 ;

/*          Зерно катализатора 5*5 мм          */
Sk[2][0] = 24330.0 ; Sk[2][1] = 59.2 ; Sk[2][2] = 3.57e-06 ;
Sk[2][3] = 0.000021; Sk[2][4] = 104.2 ; Sk[2][5] = 1.29e-10 ;
Sk[2][6] = 0.000213; Sk[2][7] = 32000.0; Sk[2][8] = 0.214 ;
Sk[2][9] = 6.24e-09; Sk[2][10] = 0.000777 ;

/*          Зерно катализатора 4*4 мм          */
Sk[3][0] = 133000.0 ; Sk[3][1] = 149.0 ; Sk[3][2] = 1.937e-06 ;
Sk[3][3] = 0.0000135; Sk[3][4] = 101.4 ; Sk[3][5] = 1.28e-10 ;
Sk[3][6] = 0.000867 ; Sk[3][7] = 29800.0; Sk[3][8] = 0.044 ;
Sk[3][9] = 9.2e-09 ; Sk[3][10] = 0.00127 ;

/*          Зерно катализатора 3*3 мм          */
Sk[4][0] = 1268000.0; Sk[4][1] = 211.0 ; Sk[4][2] = 9.602001e-07;
Sk[4][3] = 3.189e-06; Sk[4][4] = 137.3 ; Sk[4][5] = 1.02e-09 ;
Sk[4][6] = 0.0000055; Sk[4][7] = 33100.0; Sk[4][8] = 0.00276 ;
Sk[4][9] = 9.25e-09 ; Sk[4][10] = 0.0013 ;

/*          Зерно катализатора 2*2 мм          */
Se[0][0] = -6900; Se[0][1] = -4400 ; Se[0][2] = 13000;
Se[0][3] = 9000; Se[0][4] = -6000 ; Se[0][5] = 23500;
Se[0][6] = 10600; Se[0][7] = -11300; Se[0][8] = -1050;
Se[0][9] = 21450; Se[0][10] = 8600 ;

/*          Зерно катализатора 6*6 мм          */
Se[1][0] = -7000; Se[1][1] = -4300 ; Se[1][2] = 12500;
Se[1][3] = 11000; Se[1][4] = -5500 ; Se[1][5] = 23500;
Se[1][6] = 10600; Se[1][7] = -11400; Se[1][8] = -1050;
Se[1][9] = 21450; Se[1][10] = 8800 ;

/*          Зерно катализатора 5*5 мм          */
Se[2][0] = -7600; Se[2][1] = -4100 ; Se[2][2] = 13600;
Se[2][3] = 11300; Se[2][4] = -5000 ; Se[2][5] = 23140;
Se[2][6] = 9430 ; Se[2][7] = -10500; Se[2][8] = -1400;
Se[2][9] = 21470; Se[2][10] = 9000 ;

/*          Зерно катализатора 4*4 мм          */
Se[3][0] = -9420; Se[3][1] = -4600; Se[3][2] = 14000 ;
Se[3][3] = 11600; Se[3][4] = -4820; Se[3][5] = 23900 ;
Se[3][6] = 8500 ; Se[3][7] = -9800; Se[3][8] = -1080 ;
Se[3][9] = 21470; Se[3][10] = 8730 ;

/*          Зерно катализатора 3*3 мм          */
Se[4][0] = -11800; Se[4][1] = -4900; Se[4][2] = 14600;
Se[4][3] = 13000 ; Se[4][4] = -5000; Se[4][5] = 24000;
Se[4][6] = 8600 ; Se[4][7] = -9700; Se[4][8] = -1040;
Se[4][9] = 21470 ; Se[4][10] = 8700 ;

```



```

/*          Зерно катализатора 2*2 мм          */
if( t5[7]<0.0065 ) RD=1.0;
if( t5[7]<0.0055 ) RD=2.0;
if( t5[7]<0.0045 ) RD=3.0;
if( t5[7]<0.0035 ) RD=4.0;
if( t5[7]<0.0025 ) RD=5.0;
for( z=0; z<11; z++ ) { EN[z]=Se[RD][z]; KO[z]=Sk[RD][z]; }
E11=1-t5[10]; KO[0]=KO[0]*E11; KO[1]=KO[1]*E11;
KO[8]=KO[8]*E11;
YR[0]=1.0;
for(i=0; i<n; i++ ) { YR[i+1]=YR[i]+1; }
LA=0.0; PR=Prin; POK=0.0;
for( i=0; i<n; i++ )
{
    D[i]=1 - 1/(2*YR[i]-1);
    O[i]=1 + 1/(2*YR[i]-1);
}
H=t5[8]/n; H1=t5[9]/n1; Aa[0]=KT*H/LR; Aa[1]=H * H/DR;
Aa[2]=H * H/LR;
Aa[3]=t5[11]*H*H/DR/H1; Aa[4]=t5[11]*H*H/LR/H1;
for( j=0; j<m2; j++ ) { B[j]=2 + t5[11]*H*H/LR/H1*Cp; }
for( i=1; i<m; i++ ) { B[i]=2 + t5[11]*H*H/DR/H1; }
for( j=0; j<m; j++ ) { Q[1][j]=0.0; P[1][j]=1.0; }
Shet=6;
for( j=0; j<m; j++ )
{
    for( i=0; i<n; i++ ) { Cc[i][j]=t5[j+Shet]; }
    Shet=1;
}
TX=Txl1+273; DP=0.0; DL=0.0; SM[5]=0.0; SM[6]=1.0; TAUk=0.0;
Print_tr( reztr, 0, Txl1, DP, DL, TAUk, Mtgt, KMT, DT1, SM, t5 );
for( i=0; i<n2; i++ ) { Cc[i][0]=Cc[i][0]+273; }

M13:    for( i=1; i<n; i++ )
{
    C[0]=Cc[i][1]; C[1]=Cc[i][2]; C[2]=Cc[i][3]; C[3]=Cc[i][4];
    T=Cc[i][0];
    kintr( T, Cp, C, Ff, Aa, KO, EN );
    F[0]=Ff[0]; F[1]=Ff[1]; F[2]=Ff[2]; F[3]=Ff[3]; F[4]=Ff[4];
    for( j=0; j<m; j++ )
    {
        P[i+1][j]=O[i]/(B[j] - D[i]*P[i][j]);
        Q[i+1][j]=(D[i]*Q[i][j] + F[j])/(B[j] - D[i]*P[i][j]);
    }
}
for( j=0; j<m2; j++ )
{ Cc[n2-1][j]=(Q[n2-1][j] + Aa[0]*TX)/(1+Aa[0]-P[n2-1][j]); }
for( j=1; j<m; j++ )
{ Cc[n2-1][j]=Q[n2-1][j]/(1-P[n2-1][j]); }
for( j=0; j<m; j++ )
{

```

```

        for( i=0; i<n; i++ )
        { k=n-i-1; Cc[k][j]=P[k+1][j]*Cc[k+1][j] + Q[k+1][j]; }
    }
    if( DL<t5[9] )                goto M14;
    POK=777.0;                    goto M16;

M14:    LA=LA+1; DL=LA*H1;
        if( Cc[0][0]<Mtgt )      goto M15;
        Mtgt=Cc[0][0]; KMT=DL; DT1=Cc[0][0]-Cc[n2-1][0];

M15:    if( DL<PR )              goto M13;

M16:    for( i=0; i<n2; i++ )
    {
        Cc[i][0]=Cc[i][0]-273; RCC=t5[2]-Cc[i][1];
        Cc[i][5]=RCC/t5[2]; Cc[i][6]=(Cc[i][2]-t5[3])/RCC;
    }
    DP=DP1*DL; TAUk=DL/t5[11];
    for( i=0; i<n2; i++ ) { Cc[i][0]=Cc[i][0]+273; }
        MN=n2-2; NM=n2-1;
    for( j=0; j<10; j++ ) { SM1[j]=0.0; SM2[j]=0.0; SM[j]=0.0; }
    for( j=0; j<7; j++ )
    {
        E=0.0; E1=-H; E2=0.0;
        for( i=1; i<NM; i+=2 )
        { E1=E1 + 2*H; SM1[j]=SM1[j] + E1*Cc[i][j]; }
        for( i=2; i<=MN; i+=2 )
        { E2=E2 + 2*H; SM2[j]=SM2[j] + E2*Cc[i][j]; }
        SM[j]=(E*Cc[0][j] + 4*SM1[j] + 2*SM2[j] +
            t5[8]*Cc[n2-1][j])*2*H/3/(pow(t5[8], 2));
    }
    SM[0]=SM[0]-273;
Print_tr( reztr, 1, Tx11, DP, DL, TAUk, Mtgt, KMT, DT1, SM, t5 );
    if( POK>1 )                goto M17;
    SM[0]=SM[0]+273; PR=PR+Prin; goto M13;

M17:    Mtgt=Mtgt-273;
        Print_tr( reztr, 2, Tx11, DP, DL, TAUk, Mtgt, KMT, DT1, SM,
t5 );
    }
    fclose(reztr);
}
else return 14;
return 0;
}

```

Лістинг програми «PFE_2_4.EXE»

```

#include "stdio.h"
#include "conio.h"
#include "math.h"
#include "process.h"
#include "mem.h"
#include "alloc.h"
#include "string.h"

void main(void)
{

float X[5], B[5], H, b[3][6], y[3][17], y2[3][17], TP, AP[3][5],
BP[3][5], P[3];
float r, Cg, Cx, eq, n, k, F, A[5][17];
int NP, NO, NM, i, i2, Z, NY, nom;
char sign=' ', Ch[5][17];

FILE *resfile;
resfile=fopen("pfe_2_4.res","w");
if ((resfile=fopen("pfe_2_4.res","w"))==NULL)
{puts ("Не могу открыть файл \n"); exit (1);}

clrscr ();
textmode (C80); textcolor (LIGHTBLUE); gotoxy (15,1);
printf("ПОЛНЫЙ ФАКТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ 2-4"); gotoxy (15,2);
printf("-----");
fprintf(resfile,"\t\tПОЛНЫЙ ФАКТОРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ 2-4\n");
fprintf(resfile,"\t\t-----\n");
printf("\nВведите K (коэффициент теплопередачи, Вт/(м2·К)) > ");
scanf("%f",&k);
printf("Введите F (поверхность теплопередачи, м2) > ");
scanf("%f",&F);
printf("Введите Cg (теплоемкость горячего потока, Дж/(кг·К))>");
scanf("%f",&Cg);
printf("Введите Cx (теплоемкость холодного потока, Дж/(кг·К))> ");
scanf("%f",&Cx);
printf("\nРасходы потоков - кг/с; температура - C\n\n");

for (nom=1; nom<5; nom++) { printf("Введите X [%i] >>> ",nom);
scanf("%f",&X[nom]);}
for (nom=1; nom<5; nom++) { printf("Введите B [%i] >>> ",nom);
scanf("%f",&B[nom]); }

/*блок обнуления массивов */
for (i=1; i<=2; i++)
{ for (i2=0; i2<=4; i2++)
{b[i][i2]=0;}
}

```

```

for (i=0; i<=4; i++)
{
    for (i2=0; i2<=16; i2++)
        {A[i][i2]=0;}
}

/*расчет x*/
for (NP=1; NP<=4; NP++)
{
    H=pow(2,NP);
    for (NO=1; NO<=16; NO=NO+H)
        { for (NM=NO; NM<NO+H/2; NM++)
            {
                A[NP][NM]=X[NP]-B[NP];
            }
            for (NM=NM; NM<NO+H; NM++)
            {
                A[NP][NM]=X[NP]+B[NP];
            }
        }
}

for (NP=1; NP<=4; NP++)
{
    H=pow(2,NP);
    for (NO=1; NO<=16; NO=NO+H)
        { for (NM=NO; NM<NO+H/2; NM++)
            {
                Ch[NP][NM]='-';
            }
            for (NM=NM; NM<NO+H; NM++)
            {
                Ch[NP][NM]='+';
            }
        }
}

/*расчет y*/
for (i=1; i<=16; i++)
{
    n=(A[2][i]*Cg)/(A[1][i]*Cx);
    eq=(k*F*(A[1][i]*Cx-A[2][i]*Cg))/(A[1][i]*Cx*A[2][i]*Cg);
    r=(exp(eq)-1)/(exp(eq)-n);
    y2[1][i]=A[3][i]+(A[4][i]-A[3][i])*r*n;
    y2[2][i]=A[4][i]-(A[4][i]-A[3][i])*r;
}

/*распечатка x,y,+*/
fprintf(resfile,"  X1\t X2\t X3\t X4\t\t\t Y1\t Y2\n");

    for (i=1; i<=16; i++)
        { for (i2=1; i2<=4; i2++)
            {
                fprintf(resfile," %.2f  ",A[i2][i]);
            }
        }
}

```

```

        }
        fprintf(resfile," ");
        for (i2=1; i2<=4; i2++)
            {
                fprintf(resfile,"%c ", Ch[i2][i]);
            }
        fprintf(resfile," %.2f %.2f\n", y2[1][i],
y2[2][i]);
    }
    fprintf(resfile,"\n");

/*расчет b раб используется у внешний*/
for (Z=1; Z<=2; Z++)
    {for (NP=0; NP<=4; NP++)
        { H=pow(2,NP);
            for (NO=1; NO<=16; NO=NO+H)
                {
                    if (NP<=0){NM=NO; goto m;}
                    for (NM=NO; NM<NO+H/2; NM++)
                        {
                            b[Z][NP]=b[Z][NP]-(y2[Z][NM]/16);
                        }
m:
                            for (NM=NM; NM<NO+H; NM++)
                                {
                                    b[Z][NP]=b[Z][NP]+(y2[Z][NM]/16);
                                }
                        }
                }
    }

/*расчет у раб внутренний исп b из внешнего у*/
for (NO=1; NO<=16; NO++)
{ for (NY=1; NY<=2; NY++)
    {TP=0;
    for (NP=1; NP<=4; NP++)
        {
            TP=TP+(b[NY][NP]/B[NP])*(A[NP][NO]-X[NP]);
        }
    y[NY][NO]=b[NY][0]+TP;
    }
}

/*распечатка b*/
for (i=1; i<=2; i++)
    { fprintf(resfile,"для y%d: ",i);
for (i2=0; i2<=4; i2++)
    { fprintf(resfile,"b%d=%.4f ", i2, b[i][i2]); }
fprintf(resfile,"\n");
}
fprintf(resfile,"\n");

```

```

/*расчет и распечатка многочлена у*/
for (i=1; i<=2; i++)
    {P[i]=b[i][0];
    for (i2=1; i2<=4; i2++)
        {
        AP[i][i2]=b[i][i2]/B[i2];
        BP[i][i2]=((b[i][i2]*X[i2])/B[i2]);
        P[i]=P[i]-BP[i][i2];
        }
    }

for (i=1; i<=2; i++)
    { fprintf(resfile,"y%d=",i);
      fprintf(resfile,"%f",P[i]);
      for (i2=1; i2<=4; i2++)
          {if (AP[i][i2]>0){sign='+';}
            else {sign=' '};
            fprintf(resfile,"%c%f*x%d ",sign,AP[i][i2],i2);
          }
      fprintf(resfile,"\n");
    }

fclose (resfile);

printf("\nНажмите любую клавишу для продолжения ...");
getch ();
printf("Программа завершена ...");
}

```