

Міністерство освіти і науки України
ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «ОДЕСЬКА ПОЛІТЕХНІКА»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ
до лабораторних робіт по курсу
«МЕТОДИ АВТОМАТИЗОВАНИХ РОЗРАХУНКІВ ТА ОПТИМІЗАЦІЇ.
ЧАСТИНА 1»
для здобувачів вищої освіти за спеціальністю
161 – Хімічні технології та інженерія

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

Одеса: ОП, 2021

Методичні вказівки до лабораторних робіт по курсу «Методи автоматизованих розрахунків та оптимізації. Частина 1» для здобувачів вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія / Уклад. В.В. Брем, Ю.М. Єпутатов, О.В. Макаров, О.А. Борщ ; Держ. ун-т "Одес. політехніка". – Одеса, 2021. – 32 с.

Укладачі: Брем В.В., к.х.н., доцент,
Єпутатов Ю.М., к.х.н., доцент,
Макаров О.В., ст. викладач,
Борщ О.А., ст. викладач

В.В. Брем, Ю.М. Єпутатов, О.В. Макаров, О.А. Борщ. 161 – Хімічні технології та інженерія. Методичні вказівки до лабораторних робіт по курсу «Методи автоматизованих розрахунків та оптимізації. Частина 1». В методичних вказівках наведені короткі теоретичні відомості за темами робіт, пояснення роботи та інтерфейсу прикладних програм, приклади програмних модулів, а також надано рекомендації щодо ходу виконання лабораторних за окремими індивідуальними завданнями. Методичні вказівки призначені для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія.

ЗМІСТ

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №1. РОЗРАХУНОК І ОПТИМІЗАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ РОБОТИ АГРЕГАТУ ОДЕРЖАННЯ БЕЗМЕТАНОЛЬНОГО ФОРМАЛІНУ -----	4
ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №2. МАТЕРІАЛЬНІ РОЗРАХУНКИ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СХЕМ-----	9
ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №3. ПРЕДСТАВЛЕННЯ СТРУКТУРИ ХТС. ВИЗНАЧЕННЯ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОЇ ПОСЛІДОВНОСТІ РОЗІМКНУТОЇ СИСТЕМИ-----	12
ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №4. АНАЛІЗ СТРУКТУРИ ХТС -----	21
ЛІТЕРАТУРА -----	32

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №1.

РОЗРАХУНОК І ОПТИМІЗАЦІЯ ПАРАМЕТРІВ РОБОТИ АГРЕГАТУ ОДЕРЖАННЯ БЕЗМЕТАНОЛЬНОГО ФОРМАЛІНУ

МЕТА РОБОТИ:

- провести розрахунки полів концентрацій компонентів і температури в двох частинах реакторного блоку агрегату для окислювання метанолу у формальдегід, користаючись готовими прикладними програмами;
- аналізуючи отримані результати, визначити технологічні параметри роботи і показники функціонування агрегату для одержання формальдегіду.

1. ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

У реакторному блоці каталізатор розташований двома шарами. Перший шар, по руху газового потоку, знаходиться в трубках трубчастої частини реактора. Через стінки трубок здійснюється відвід (для екзотермічних процесів) чи підведення (для ендотермічних процесів) тепла за допомогою зовнішнього теплоносія, подаваного в міжтрубний простір. Безпосередньо після трубчастої частини газова суміш надходить на полицю з адіабатичним шаром каталізатора, де хімічний процес проходить без теплообміну з навколишнім середовищем. Схема такого реактора приведена на рис. 1а, а графік зміни температури в шарах каталізатора – на рис. 1б.

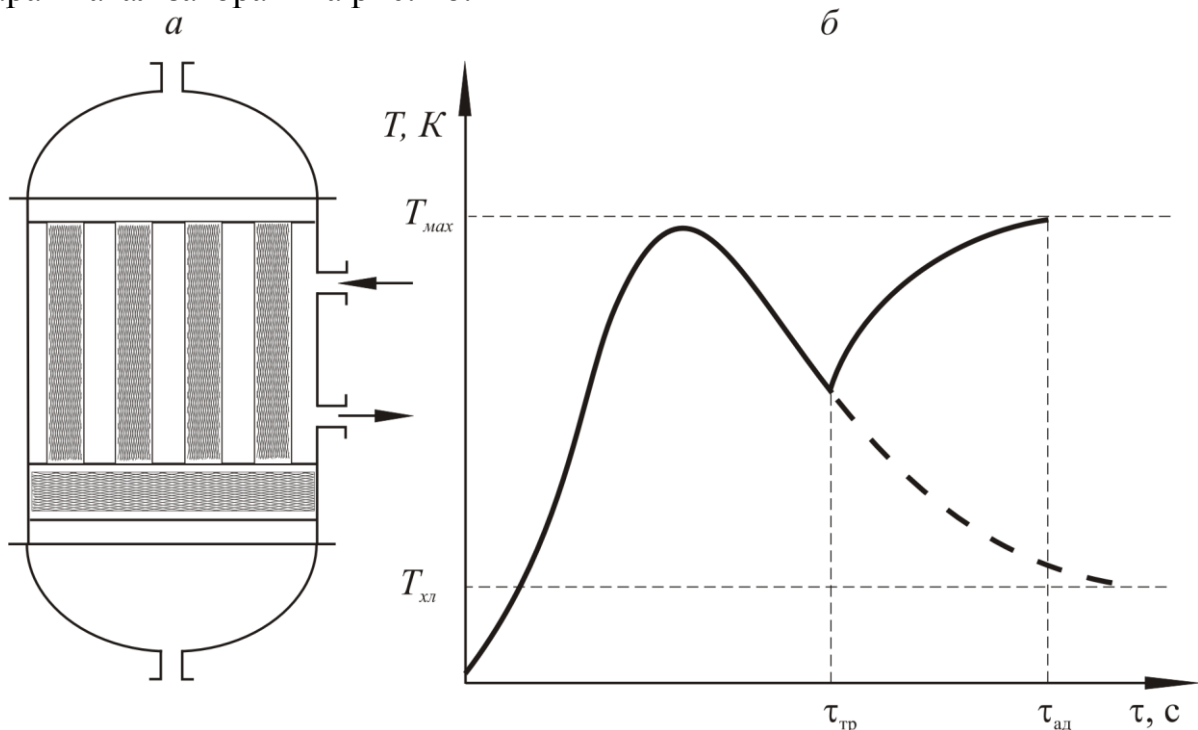


Рис. 1. Моделювання процесу окислення метанолу в формальдегід в комбінованому реакторі: а – схема реактора, б – залежність зміни температури від часу

Як видно на рис.1б заключна частина хімічного процесу в адіабатичному шарі (показано суцільною лінією) проходить при більш високій температурі, чим 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 оптимального 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 трубчастого реактора і для шару, що працює в адіабатичних умовах. З описом математичних моделей і прикладних програм «Трубчастий реактор» і «Адіабатичний реактор», що входять до складу програмного комплексу COMPLEX.EXE, потрібно ознайомитися в методичних указівках до лабораторного практикуму з курсу «Математичне моделювання і застосування ЕОМ у хімічній технології» у лабораторних роботах «Моделювання трубчастого реактора для процесу окислювання метанолу на окисних каталізаторах» і «Моделювання процесу окислювання метанолу у формальдегід у реакторі з адіабатичними шарами каталізатора».

Отримані результати розрахунку на ЕОМ шару каталізатора в трубках і адіабатичному шарі дозволяють однозначно визначити всі основні технологічні параметри комбінованого реактора: склад і температуру суміші на вході в апарат, 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, склад і температуру реакційної суміші на виході з трубок із каталізатором і на виході з реактору, безрозмірні характеристики хімічного процесу – ступінь перетворення, селективність і вихід цільового продукту. Ці дані використовуються на подальших етапах проектування технологічної схеми і самого реактора.

2. МЕТОДИКА РОЗРАХУНКІВ

Розрахунок комбінованого реактора проводиться роздільно, спочатку для трубчастої частини, а потім для адіабатичної. Методика розрахунку трубчастого реактора, проведена по програмі «Трубчастий реактор», описана в лабораторній роботі, присвяченій розрахунку трубчастого реактора.

1) Вибрати розмір зерен каталізатора для трубчастої частини. При цьому варто використовувати співвідношення:

$$4 \leq D_{\text{тр}}/D_3 \leq 6$$

2) 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.

- 3) Після підбору температури теплоносія, установити час контакту для трубчастої частини комбінованого реактора. Оскільки правильність вибору часу контакту і пов'язаної з ним довжини трубки можна оцінити за результатами розрахунку адіабатичного шару каталізатора, на цьому етапі як правило зупиняються на декількох варіантах, для яких ступінь перетворення входить у заданий діапазон. Крім того, приймаючи рішення про можливі довжини трубки з каталізатором, потрібно врахувати обмеження по гідравлічному опорі 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, починаючи з підбору температури теплоносія, приходиться повторювати.

- 4) 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 по програмі «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.

Час контакту й умови проведення процесу в адіабатичному шарі каталізатора вибирають по максимальному виходу цільового продукту з урахуванням обмежень по максимально допустимій температурі. У роботі обов'язково необхідно показати, що удалося досягти максимуму по виходу цільового продукту чи по концентрації формальдегіду. Тільки таким способом вирішується задача вибору оптимального часу контакту і ступеня перетворення в реакторах. 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.

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 припустимою – 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.

3. ОФОРМЛЕННЯ ПРОТОКОЛУ

У протоколі по лабораторній роботі повинна бути описана мета роботи, короткі теоретичні зведення, хід виконання роботи відповідно до приведеної методики, усі виконані розрахунки з висновками по кожному варіанту.

Розрахунки варто описувати коротко, наприклад, у виді таблиці з наборами висхідних даних для кожного з них і аналізом отриманих результатів. У протоколі повинні бути побудовані графіки зміни температури, ступеня перетворення і селективності від часу контакту для реактора в цілому.

4. КОНТРОЛЬНІ ПИТАННЯ

- 1) Охарактеризувати конструкцію комбінованого реактора, умови роботи і температурне поле двох його шарів каталізатора.
- 2) Математична модель, що описує каталітичний процес у трубчастій частині реактора.
- 3) Математична модель, що описує каталітичний процес в адіабатичній частині реактора.
- 4) Як проводиться вибір параметрів трубчастої частини?
- 5) Технологічні вимоги, що пропонуються до адіабатичного шару каталізатора.
- 6) У якого типу реакторах можна щонайкраще реалізувати теоретично оптимальний температурний режим для реакції $A \rightarrow B \rightarrow D$ для випадку, коли $E_1 > E_2$.

5. ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Номер завдання відповідає номеру прізвища студента по журналу. Склад висхідної суміші приймається по номеру варіанта. Спочатку по таблиці 1 визначають умовні позначки концентрацій: ліві стовпчики цифр – для студентів групи 1, праві – 2. Потім по таблиці 2 знаходять значення концентрацій чотирьох компонентів (моль/м³), що використовують у розрахунках. У табл. 3 приведені дані по трубчастій частині реакторного блоку.

Вихідні дані, загальні для усіх варіантів:

Температура паро-газової суміші на вході в реактор	(170 – 190)°C
Гранична допустима температура:	
– у трубках	365°C
– в адіабатичному шарі	355°C
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	0,86–0,92

трубчастої частини

Швидкість газу в трубках (перше наближення)

1,8 м/с

Припустимий гідравлічний опір реактора

0,03 МПа

Таблиця 1 – Склад висхідної суміші

№ вар.	Умовне позначення концентрації компонента			
	Метанол	Формальдегід	Кисень	Вода
1	М1 М1	Ф1 Ф3	К1 К1	В1 В3
2	М2 М3	Ф1 Ф3	К1 К1	В1 В3
3	М1 М1	Ф2 Ф1	К1 К3	В1 В3
4	М2 М3	Ф2 Ф1	К1 К3	В1 В3
5	М1 М1	Ф1 Ф3	К2 К3	В1 В3
6	М2 М3	Ф1 Ф3	К2 К3	В1 В3
7	М1 М2	Ф2 Ф3	К2 К3	В1 В3
8	М2 М3	Ф2 Ф2	К2 К3	В1 В3
9	М1 М2	Ф1 Ф2	К1 К3	В2 В3
10	М2 М3	Ф1 Ф3	К1 К2	В2 В3
11	М1 М2	Ф2 Ф3	К1 К2	В2 В3
12	М2 М3	Ф2 Ф2	К1 К2	В2 В3
13	М1 М2	Ф1 Ф2	К2 К2	В2 В3
14	М2 М3	Ф1 Ф3	К2 К2	В2 В2
15	М1 М2	Ф2 Ф3	К2 К3	В2 В2
16	М2 М3	Ф2 Ф2	К2 К3	В2 В2
17	М3 М2	Ф1 Ф2	К1 К3	В1 В2
18	М1 М3	Ф3 Ф3	К1 К2	В1 В2
19	М3 М2	Ф3 Ф3	К1 К2	В1 В2
20	М1 М3	Ф1 Ф2	К3 К2	В1 В2
21	М3 М3	Ф1 Ф2	К3 К3	В1 В1
22	М1 М2	Ф3 Ф3	К3 К3	В1 В1
23	М3 М3	Ф3 Ф2	К3 К2	В1 В1
24	М1 М2	Ф1 Ф1	К1 К1	В3 В3
25	М3 М2	Ф1 Ф1	К1 К1	В3 В3

Таблиця 2 – 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

Таблиця 3 – Вихідні дані для розрахунку трубчастої частини реактора

№ вар.	Внутрішній діаметр трубки, м	Діапазон температури хладагенту, °C	№ вар.	Внутрішній діаметр трубки, м	Діапазон температури хладагенту, °C
ГРУПА 1			ГРУПА 2		
1	0,020	240 – 285	1	0,022	230 – 285
2	0,022	235 – 275	2	0,024	235 – 290
3	0,024	230 – 270	3	0,026	235 – 275
4	0,027	225 – 265	4	0,028	220 – 270
5	0,030	220 – 260	5	0,030	225 – 265
6	0,024	230 – 280	6	0,020	235 – 285
7	0,027	220 – 270	7	0,024	225 – 275
8	0,021	235 – 280	8	0,021	235 – 285
9	0,022	235 – 290	9	0,025	235 – 275
10	0,024	235 – 275	10	0,028	230 – 270
11	0,027	220 – 270	11	0,022	225 – 270
12	0,030	220 – 260	12	0,030	220 – 265
13	0,024	230 – 280	13	0,018	230 – 285
14	0,027	220 – 270	14	0,021	225 – 270
15	0,021	235 – 280	15	0,027	230 – 270
16	0,022	225 – 280	16	0,020	235 – 280
17	0,024	235 – 275	17	0,026	225 – 275
18	0,018	240 – 290	18	0,016	240 – 295
19	0,020	230 – 280	19	0,028	230 – 270
20	0,022	230 – 290	20	0,024	230 – 280
21	0,024	230 – 280	21	0,020	230 – 285
22	0,026	220 – 280	22	0,026	220 – 260
23	0,018	240 – 290	23	0,018	240 – 285
24	0,022	230 – 280	24	0,026	235 – 285
25	0,021	230 – 280	25	0,022	240 – 280

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №2.

МАТЕРІАЛЬНІ РОЗРАХУНКИ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СХЕМ

МЕТА РОБОТИ:

– зробити розрахунки матеріальних потоків різних схем установки одержання формаліну (37 %).

1. ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

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

Відмітна 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.

Розрахунки ХТС пов'язані як зі створенням (синтезом), так і з дослідженням, розрахунком (аналізом) і експлуатацією (керуванням) ХТС. Усі методи розрахунків можна підрозділити на 3 великі 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 основного органічного синтезу, вдається виділити загальний характерний блок, що включає обмежену кількість елементів (рис. 2). 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.

2. 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".

Перелік висхідних даних програми "СХЕМА":

- Продуктивність установки по формаліну, тис.т / рік;
- Безрозмірні параметри хімічного процесу в реакторі – ступінь перетворення і селективність;

- Концентрації продуктів у потоці на вході в реактор для метанолу, кисню і води, моль/м³.

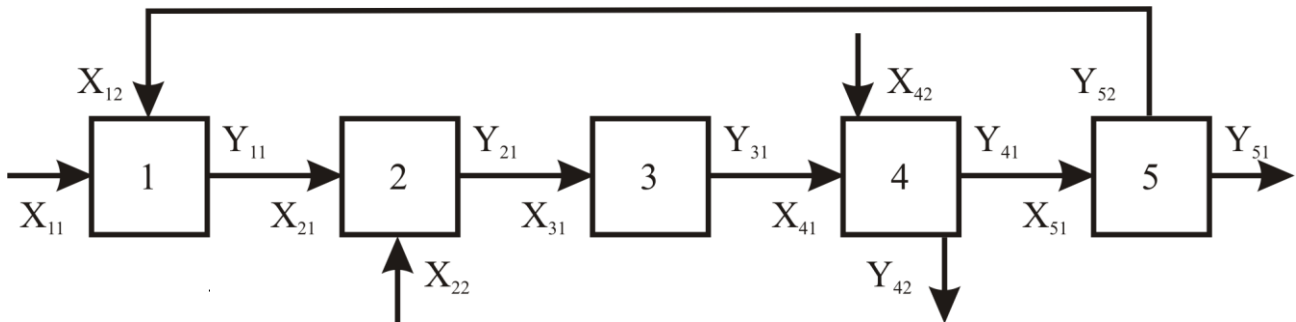


Рис. 2. Основний (розрахунковий) блок схеми:

- 1,2 – змішувачі; 3 – реактор окислювання; 4,5 – роздільники;
- X_{ij} – вхідні потоки; Y_{ij} – вихідні потоки; i – індекс елемента (апарата);
- j – порядковий номер вхідного або вихідного потоку апарата

Всі інші параметри математичної моделі використані при складанні програми у виді констант, значення яких розраховані з використанням показників діючого виробництва.

3. МЕТОДИКА ВИКОНАННЯ РОБОТИ

- 1) Виконати розрахунок трубчастого реактора для процесу окислювання метанолу у формальдегід по висхідним даним, приведеним у таблицях 1–3 лабораторної роботи “Розрахунок параметрів роботи агрегату одержання безметанольного формаліну” і даним, загальним для усіх варіантів (приведені нижче). Скласти таблиці матеріального балансу апаратів – реактора, абсорбера і всієї установки для базового варіанта.
- 2) Для обраного режиму вибрати ті значення часу контакту, для яких величина ступеня перетворення більше 0,83 (число крапок повинне бути не менш 7).
- 3) Виконати матеріальні розрахунки схеми установки одержання формаліну для всіх обраних варіантів у пункті 2 при постійній продуктивності. Продуктивність по формаліну прийняти по курсовій роботі.
- 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).Побудувати графіки залежностей.

4. ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

Номер завдання відповідає номеру прізвища студента по журналу.

Склад висхідної суміші приймається по таблиці 1 і 2, по таблиці 3 визначають параметри трубчастого реактора.

Висхідні дані загальні для усіх варіантів:

Температура паро-газової суміші на вході в реактор	180°C
Гранична допустима температура у трубках	365°C
Діаметр трубок	0,020 м
Еквівалентний діаметр часток каталізатора в трубках	4 мм
Ступінь перетворення метанолу в реакторі	0,98
Пористість шару каталізатора в трубках	0,41
Діапазон зміни температур теплоносія в міжтрубному просторі, що рекомендується	240–260°C
Швидкість газу в трубках (перше наближення)	1,4 м/с
Допустимий гідравлічний опір реактора	0,03 Мпа

ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №3.

ПРЕДСТАВЛЕННЯ СТРУКТУРИ ХТС. ВИЗНАЧЕННЯ ОБЧИСЛЮВАЛЬНОЇ ПОСЛІДОВНОСТІ РОЗІМКНУТОЇ СИСТЕМИ

МЕТА РОБОТИ:

- представити структуру ХТС із використанням різних способів;
- визначити обчислювальну послідовність розрахунку схеми.

1. ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

1.1. 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 безлічі вершин X і безлічі орієнтованих дуг U , їх з'єднуючих.

Послідовність орієнтованих дуг, що дозволяють пройти з однієї вершини графів в іншу, називається *шляхом*. Шлях, початкова вершина якого, збігається з кінцевою, причому кожна вершина, за винятком початкової, проходиться тільки один раз, називається *контуром*.

Вершини, з'єднані дугою, називаються *інцидентними*. Вершина, у котру входить дуга, називається *позитивно інцидентною* стосовно тієї, з якої ця дуга виходить. Вершина, з якої виходить дуга, називається *негативно інцидентною* стосовно тієї, у яку ця дуга входить.

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

- матеріальний потоковий граф по загальній масовій витраті (МПП);
- тепловий потоковий граф (ТПГ);

– параметричний потоковий граф (ППГ).

При такому представленні ХТС вершини графа відповідають її елементам, а дуги – технологічним потокам.

При зображенні графів ХТС зовнішнє середовище умовно позначається фіктивним нульовим елементом, а відповідна їй вершина має нульовий номер.

При виконанні роботи необхідно скласти матрицю суміжності, список зв'язку, А– і В– таблиці зв'язків. Матриця суміжності являє собою квадратну таблицю, кількість рядків і стовпців якої дорівнює кількості вершин у графі. Рядки і стовпці матриці нумеруються. Номери рядків указують номери вершин графа, з якої виходять дуги, а номери стовпців – вершини куди входять дуги. Якщо вершини графа зв'язані дугою, то на перетинанні відповідного рядка і стовпця ставиться 1. Всі інші елементи матриці зв'язків дорівнюють нулю, і дорівнюють нулю всі діагональні елементи матриці.

Сума одиниць у рядку матриці визначає число вихідних потоків з елемента, що відповідає номеру рядка. Сума одиниць у стовпці дорівнює числу потоків, що входять у цей елемент.

Список зв'язків являє собою матрицю розміром $M \times 2$, де M – число дуг у графі. У лівому стовпці вказуються номери вершин графа, при цьому кожна вершина повторюється стільки разів, скільки потоків виходить з відповідного елемента. У правому стовпці записуються номери вершин, у котрі входять дуги вихідні з елементів, зазначених у лівому стовпці.

А– і В– таблиці зв'язків містять число рядків, рівне числу вершин графа. У i -ому рядку А–таблиці зв'язків записуються номери вершин позитивно інцидентної вершини i . У j -ому рядку В–таблиці зв'язків – номери, негативно інцидентні вершини j .

NA– і NB– таблиці являють собою модифікації таблиць А– і В–. Вони також містять число рядків, рівне числу вершин графа. У i -ому рядку NA–таблиці записуються номери дуг, що виходять з вершини i . У j -ому рядку NB–таблиці – номери дуг, що входять у вершину j .

1.2. Розрахунок обчислювальної послідовності розімкнутої системи (ОПРС)

Для розрахунку обчислювальної послідовності розімкнутої системи (ОПРС) існує таке правило – елемент може бути включений до складу ОПРС якщо відомі усі вхідні в нього потоки; інакше кажучи, якщо у ОПРС на i -ому місці знаходиться номер апарата N_i , то номери всіх апаратів, потоки з яких надходять в апарат N_i , повинні в цій обчислювальній послідовності стояти раніш, ніж апарат N_i .

Алгоритм обчислення ОПРС.

А) Відшукується k -й рядок В–таблиці зв'язків, для якого A_i дорівнює нулю.

Б) Номер цього рядка і номер вершини графа заноситься в обчислювальну послідовність.

В) Число незалежних входів для елементів, у які надходить потік з k -го елемента, зменшується на 1.

Г) Якщо число елементів, включених до обчислювальної послідовності дорівнює нулю, то ОПРС побудована. У протилежному випадку переходять до пункту А.

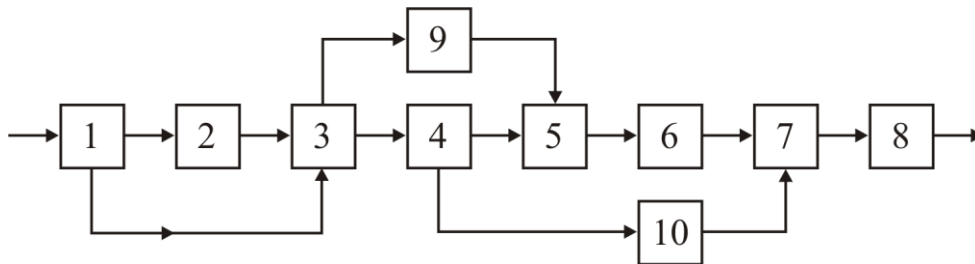
Визначивши обчислювальну послідовність для кожного комплексу, складаємо остаточну послідовність розрахунку схеми з урахуванням незалежних елементів.

2. ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ РОБОТИ

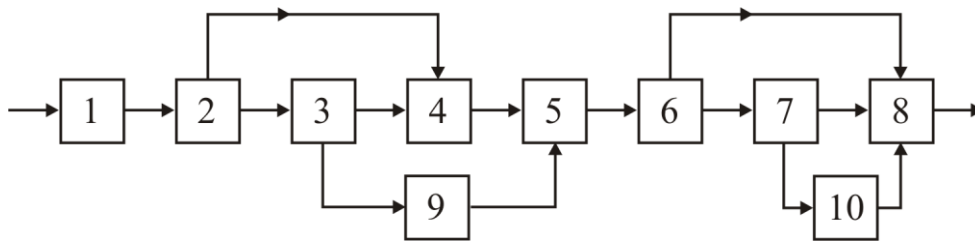
- 1) Для заданої ХТС скласти параметричний потоковий граф із указівкою зовнішнього середовища. На графі позначити номери вершин і номери дуг.
- 2) Для заданої ХТС скласти матрицю суміжності, список зв'язків, А– і В–таблиці зв'язків, NA– і NB–таблиці зв'язків.
- 3) Визначити обчислювальну послідовність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

3. ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

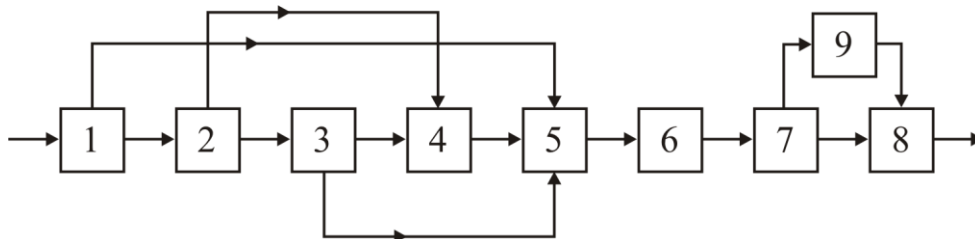
1)



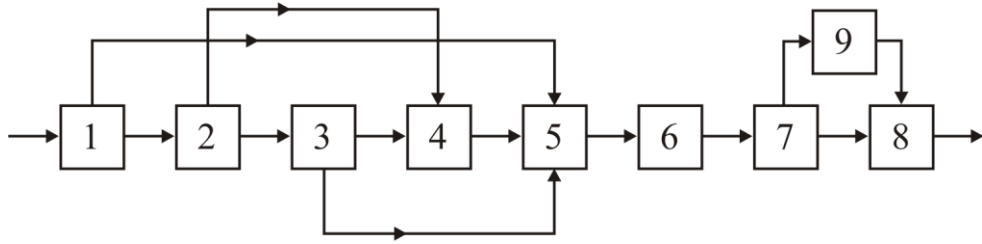
2)



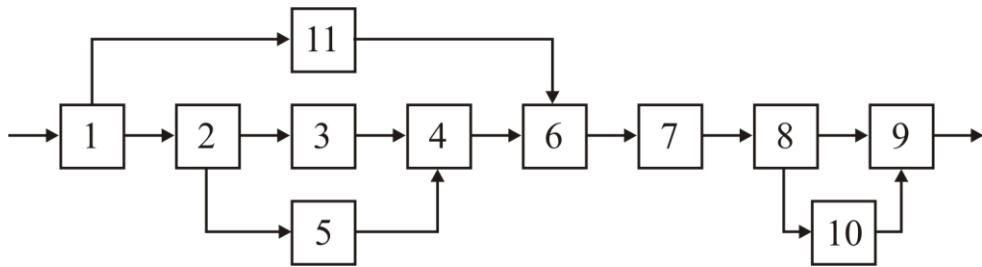
3)



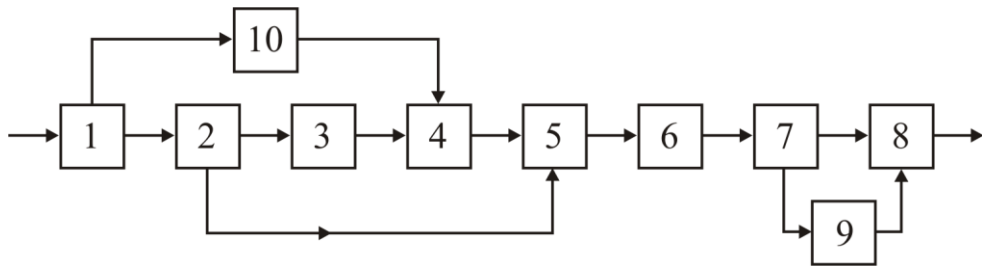
4)



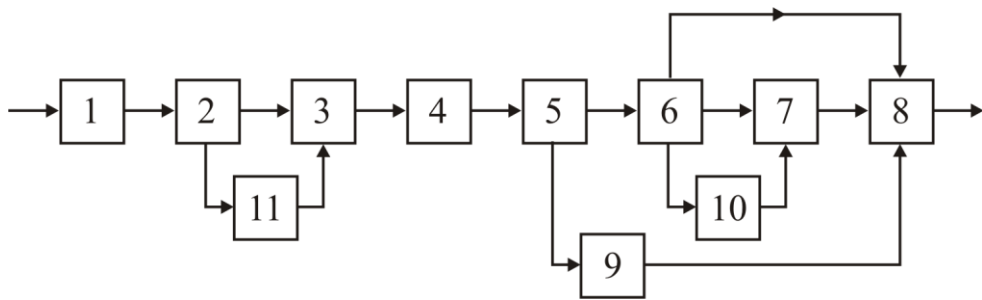
5)



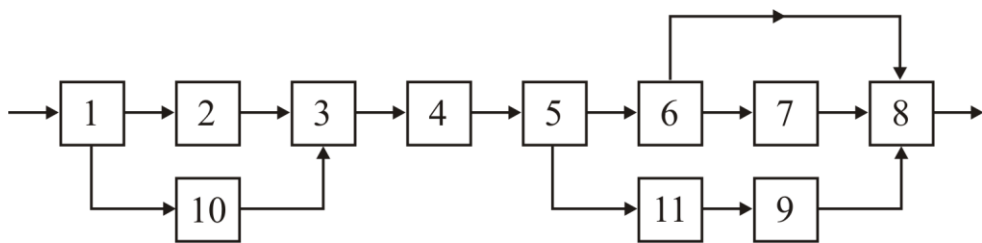
6)



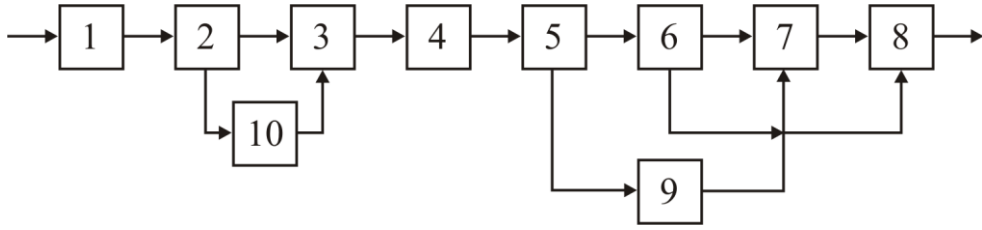
7)



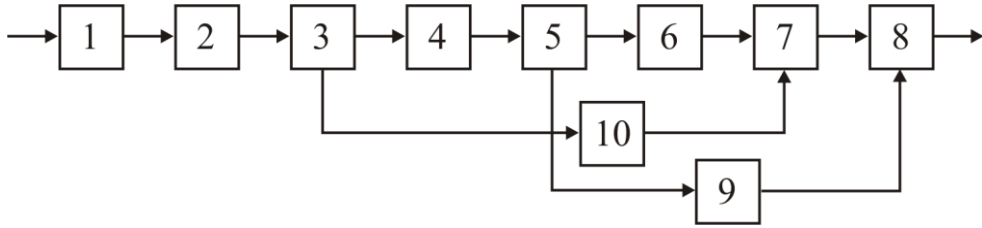
8)



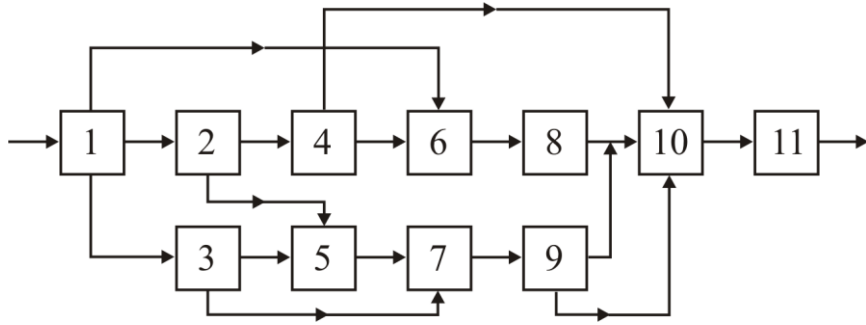
9)



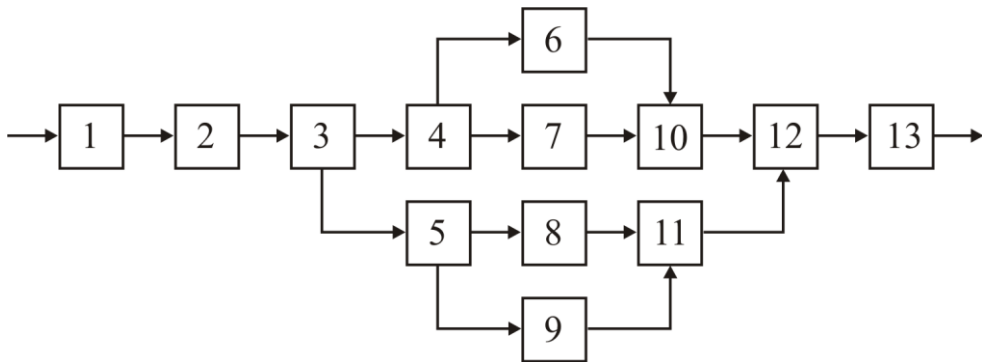
10)



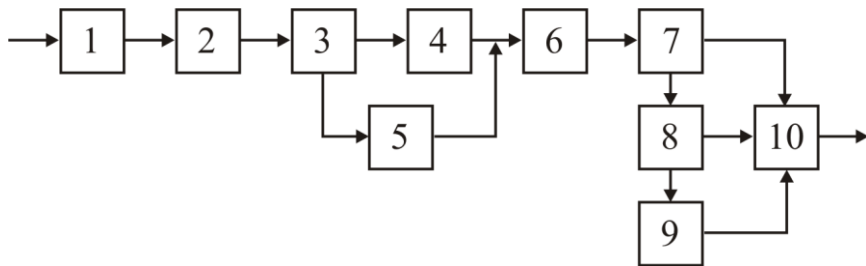
11)



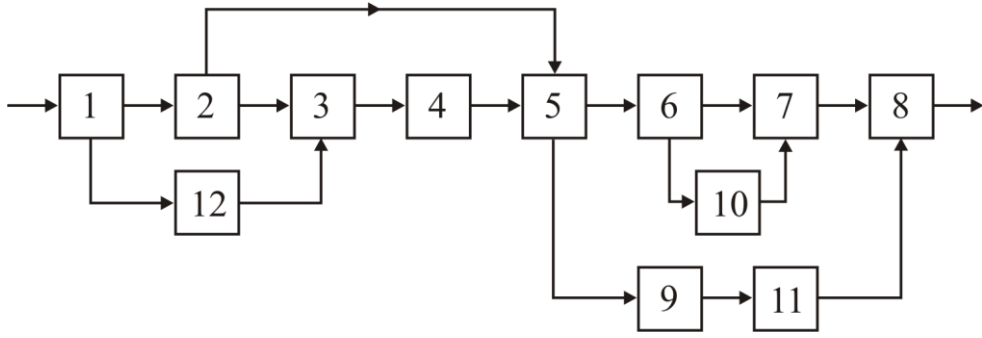
12)



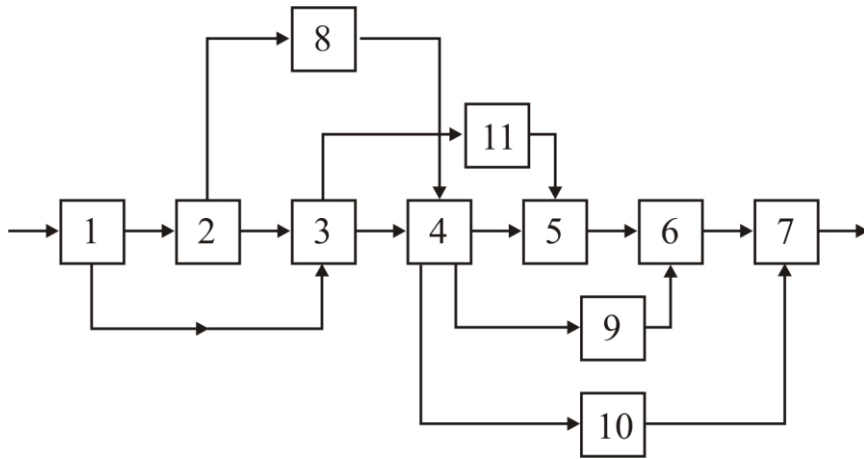
13)



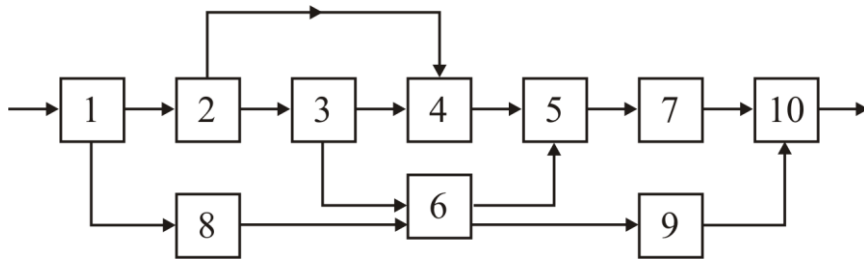
14)



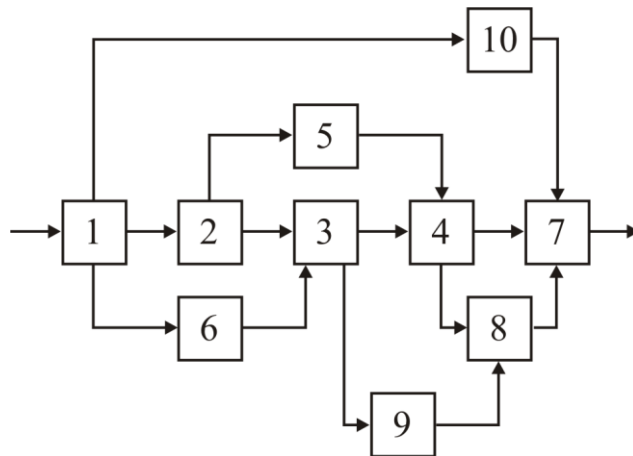
15)



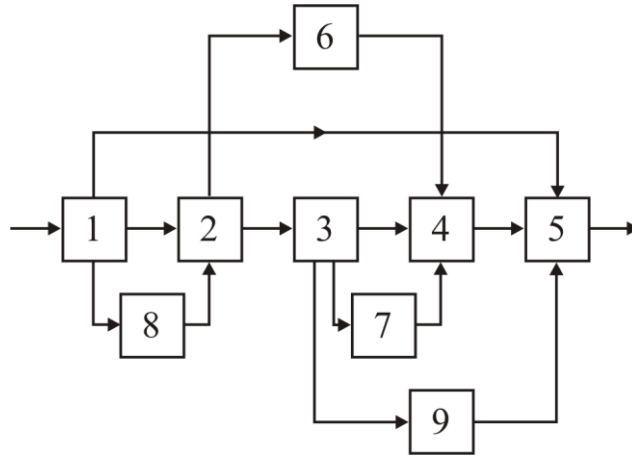
16)



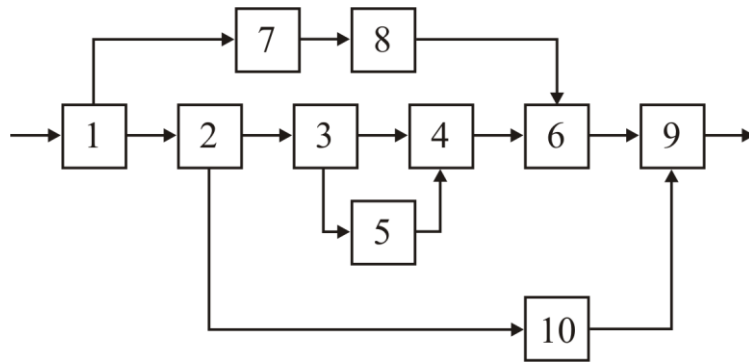
17)



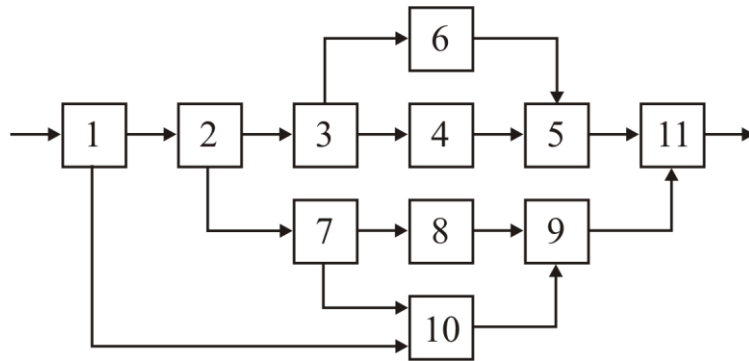
18)



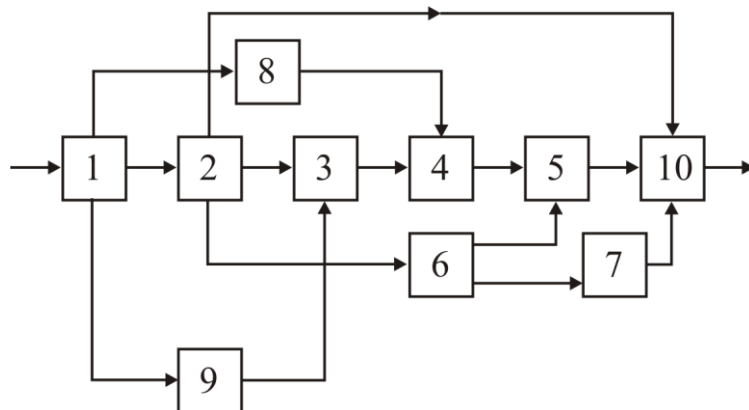
19)



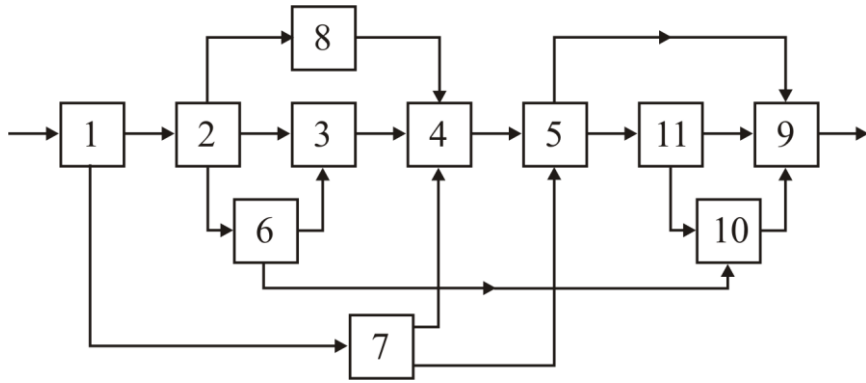
20)



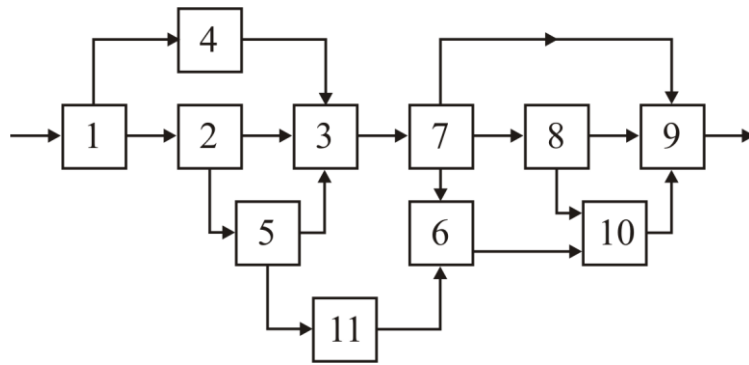
21)



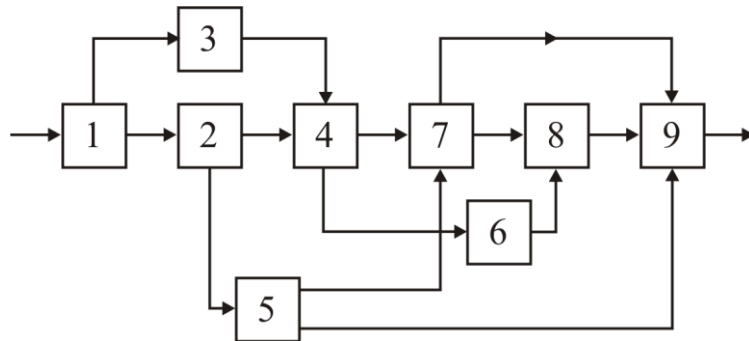
22)



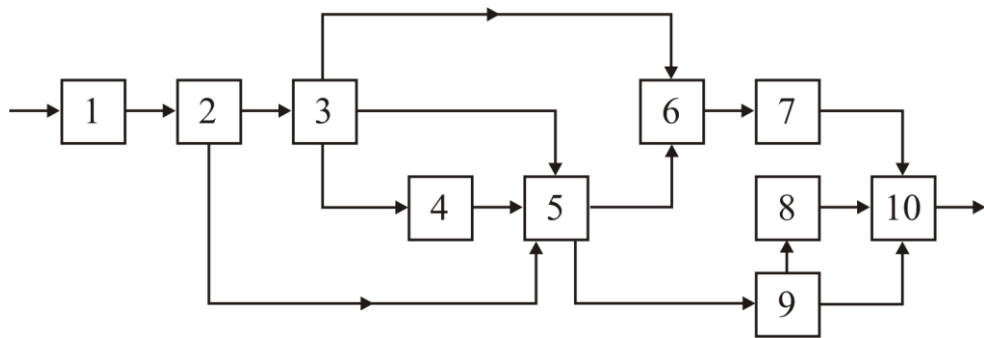
23)



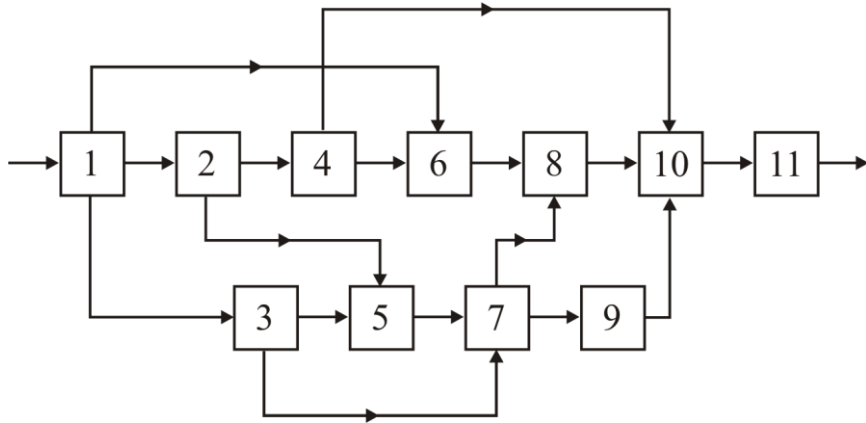
24)



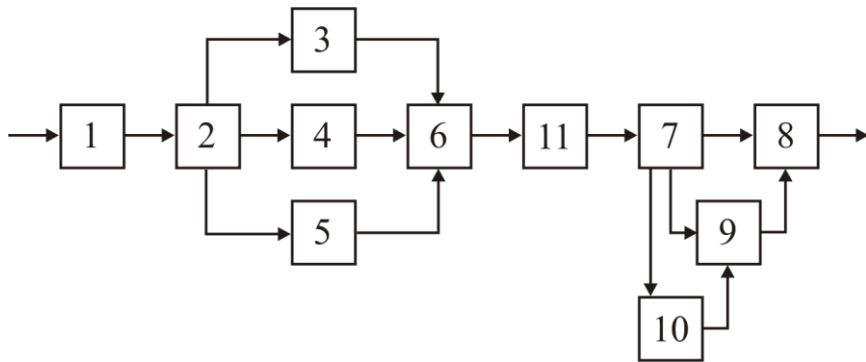
25)



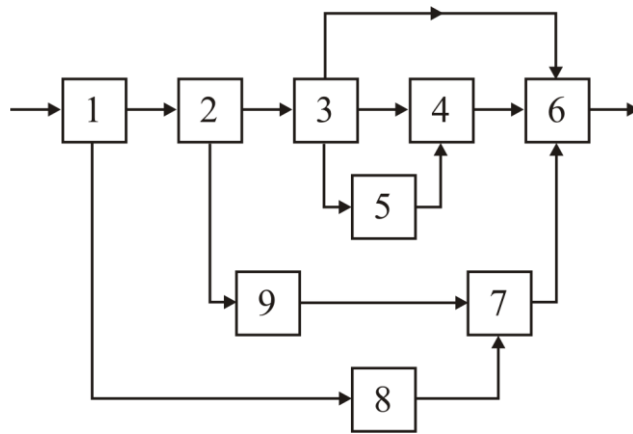
26)



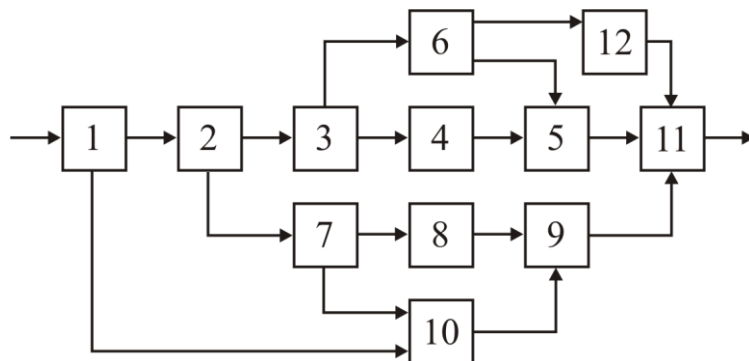
27)



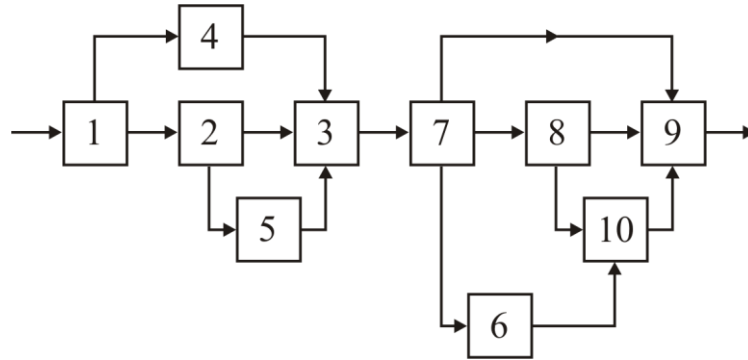
28)



29)



30)



ЛАБОРАТОРНА РОБОТА №4. АНАЛІЗ СТРУКТУРИ ХТС

МЕТА РОБОТИ:

- визначити остаточну послідовність розрахунку для заданої ХТС.
- Для цього необхідно вирішити наступні задачі:
- визначення і виділення комплексів ХТС;
 - визначення попередньої послідовності розрахунку схеми;
 - розрахунок оптимальної безлічі потоків, що розриваються, і послідовності розрахунку кожного комплексу.

1. ЗАГАЛЬНІ ВІДОМОСТІ

1.1. Виділення комплексів

Виділити комплекси на графі можна за допомогою двох методів.

1.1.1. Метод з використанням матриці шляхів

Матриця шляхів – квадратна матриця, число рядків і стовпців якої дорівнює числу елементів ХТС. Якщо на графі є шлях будь-якої довжини з вершини i у j , то на перетинанні i -ого рядка і j -го стовпця ставиться одиниця, інакше – нуль. У матриці шляхів на головній діагоналі стоять одиниці, тому що вважається, що завжди існує шлях довжиною рівною нулю з даного елемента в цей же елемент.

Після побудови матриці шляхів, будується допоміжна матриця S за правилом:

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

За допомогою матриці S визначаються комплекси, що входять до складу графа. Якщо в i -ому 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. Рядки матриці, що мають крім елемента S_{ii} інші ненульові елементи, відповідають комплексам. Однакові рядки матриці S відповідають тому самому комплексу.

1.1.2. Метод з використанням матриці суміжності

Даний метод вимагає обчислення ступенів матриці суміжності, шляхом її послідовного множення на "себе". Коли n -а ступінь матриці суміжності отримана послідовним множенням на саму себе, то можна довести, що n -а ступінь матриці "А" показує зв'язку, що проходить з будь-якого блоку до будь-якого іншого блоку, через n потоків. Так само як і у вихідній матриці, одиниці 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 стоять одні нулі, тоді розглянутий блок може бути виділений зі схеми для наступного розгляду і вилучений з вихідної матриці суміжності шляхом викреслювання відповідних стовпця і рядка. У результаті перетворень, вихідна матриця суміжності перетвориться в матрицю, де всі інші блоки входять або в комплекси, або є незалежними блоками між комплексами. Якщо утворити булеву суму всіх ступенів матриці суміжності, то її елемент буде дорівнює 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 $R_{n(m)}$ подає інформацію про зв'язки між j і i блоками. При накладенні матриці R_n на $R_{n(m)}$, одиниця зберігається тільки там, де вона була й у тієї, і в іншій матрицях. Утворена матриця називається суперпозицією (W).

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 вирішити задачу – визначення попередньої послідовності розрахунку схеми.

1.2. Визначення попередньої послідовності розрахунку схеми

У попередній послідовності розрахунку схеми (ППРС) указується порядок розрахунку незалежних елементів ХТС і виділених комплексів. Послідовність розрахунку визначається так само, як для розімкнутих систем.

1.3. Виділення контурів

Контури вхідні до складу комплексу виділяють за допомогою алгоритму з використанням прадерава комплексу.

Прадеревом комплексу з коренем K називають таке зображення всіх шляхів, що існують у комплексі, коли в кожному вершину відмінну від K входить тільки одна дуга. У вершину K прадерава жодна дуга не входить. Для побудови прадерава з будь-якої вершини комплексу, що приймають за корінь прадерава, будують усі шляхи, що існують у комплексі. Кожен шлях будують доти, поки

не зустрінеться вже наявна вершина. Кінцева вершина області прадерева – "висяча". Кожна "висяча" вершина належить контуру.

Для виділення контурів вхідних у комплекс доцільно побудувати А–таблицю внутрішніх зв'язків для вершин, що входять у комплекс і після цього будувати прадерево. Коли вже побудовано прадерево і визначені "висячі" вершини, тоді по них складають список контурів по номерах вершин графа і список контурів по номерах дуг. При цьому, той самий контур може бути виділений кілька разів. Однакові контури викреслюються. Потім, знаходять оптимально-розриваючу множину дуг.

1.4. Знаходження оптимально-розриваючої множини дуг

Задача знаходження оптимально-розриваючої множини дуг (ОРМД) вирішується двома групами методів:

- 1) Методи засновані на використанні матриці контурів;
- 2) Евристичні методи. Вони засновані на виборі рішення, виходячи з визначених правил, вироблених на основі наявного досвіду.

Розглянемо першу групу методів. Для цього необхідно побудувати матрицю контурів, елементи якої K_{ij} визначаються за правилом:

$$K_{ij} = 1, \text{ якщо дуга } j \text{ входить у контур } i;$$
$$K_{ij} = 0, \text{ якщо дуга } j \text{ не входить у контур } i.$$

Після побудови матриці контурів, визначається контурний ступінь дуги f , що дорівнює числу контурів, у які входить дана дуга (сума по стовпцях). Чим більше величина f , тим більше контурів буде розімкнуто при розриві даної дуги. Однак, якщо контурний ступінь двох чи більш дуг буде однаковий, причому ці дуги входять у ті самі контури, то необхідно визначити параметричність кожної дуги.

З двох дуг, що мають рівну f , розривається та, параметричність якої менше. Після вибору відповідної дуги, з матриці контурів убираються ті контури, що розриваються при розриві даної дуги.

Після перебування ОРМД, визначають послідовність розрахунку комплексу.

1.5. Визначення послідовності розрахунку комплексу і остаточної послідовності розрахунку схеми

Для визначення послідовності розрахунку комплексу вводяться фіктивні (ітераційні) блоки. Передбачається, що в цих блоках задаються початкові наближення значень параметрів потоків, що розриваються. Визначають послідовність розрахунку кожного комплексу так саме, як для розімкнутих систем.

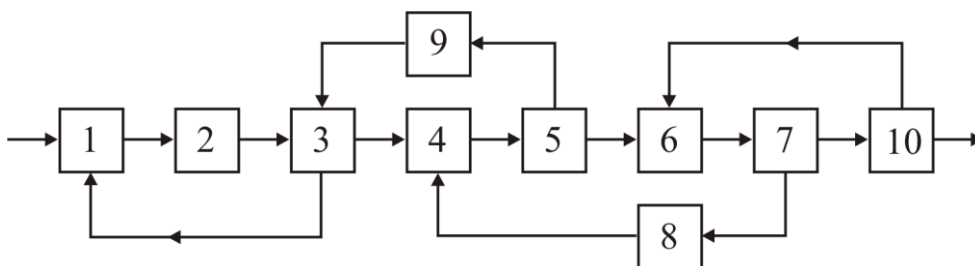
Визначивши обчислювальну послідовність для кожного комплексу, складаємо остаточну послідовність розрахунку схеми з урахуванням незалежних елементів.

2. ПОРЯДОК ВИКОНАННЯ РОБОТИ

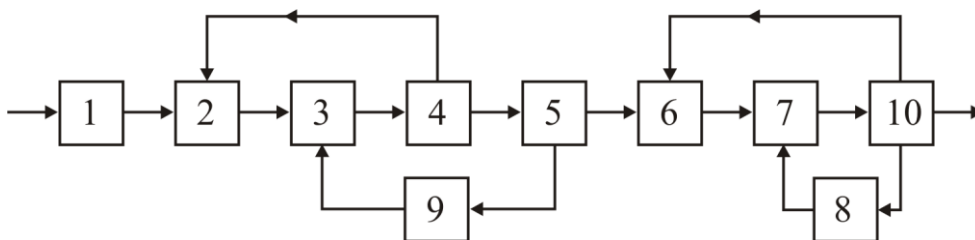
- 1) Виділити комплекси на графі за допомогою алгоритму, що використовує матрицю шляхів і допоміжну матрицю.
- 2) Виділити комплекси на графі за допомогою алгоритму, що використовує матрицю суміжності. Для цього:
 - спростити (при необхідності) вихідну матрицю суміжності;
 - використовуючи програму MATRIZ.EXE, знайти матрицю досяжності, транспоновану матрицю досяжності і суперпозицію і виділити комплекси. Програма MATRIZ.EXE знаходиться в директорії LABS.
- 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 прадерево комплексу;
 - проаналізувати отримані контури і виключити повторювані;
 - скласти списки контурів, записаних по вершинах і по дугах.
- 6) Знайти оптимально-розриваючої 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.

3. ІНДИВІДУАЛЬНІ ЗАВДАННЯ

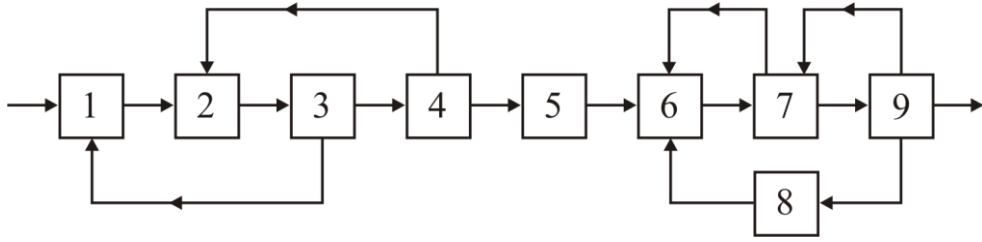
1)



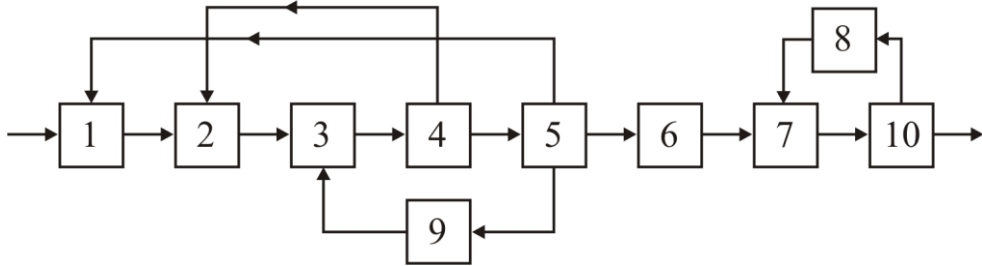
2)



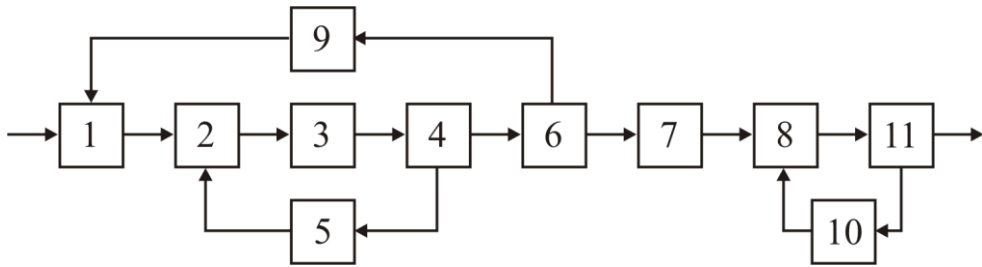
3)



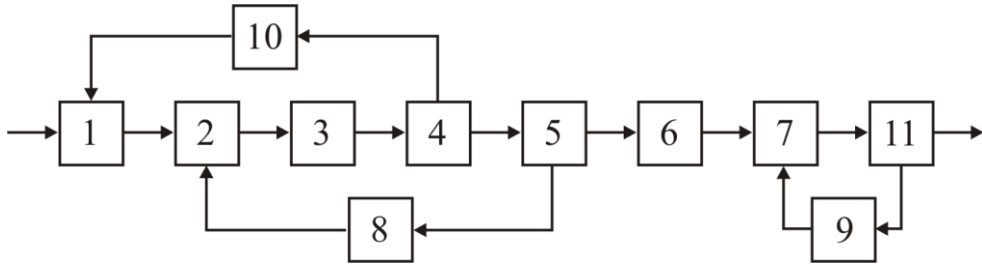
4)



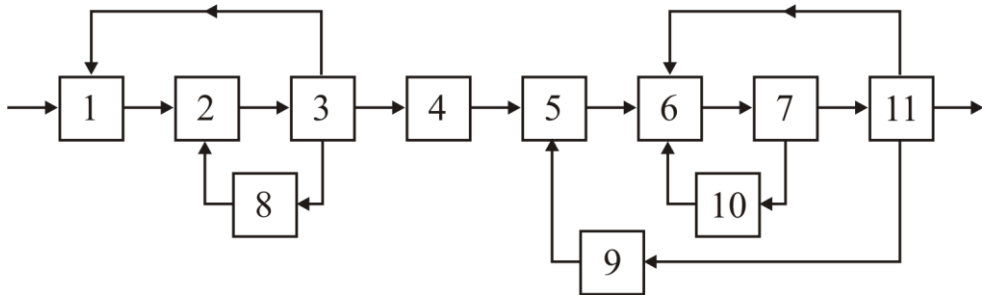
5)



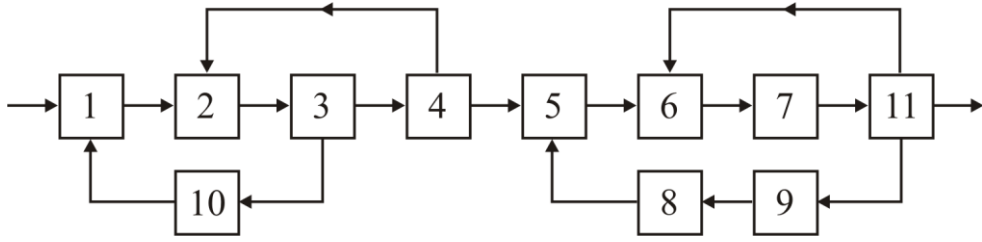
6)



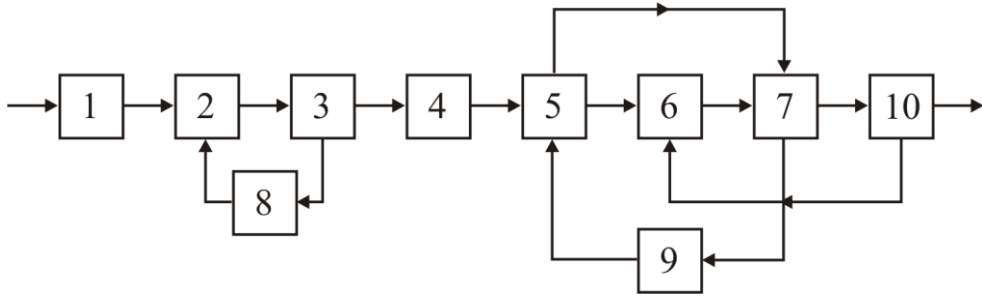
7)



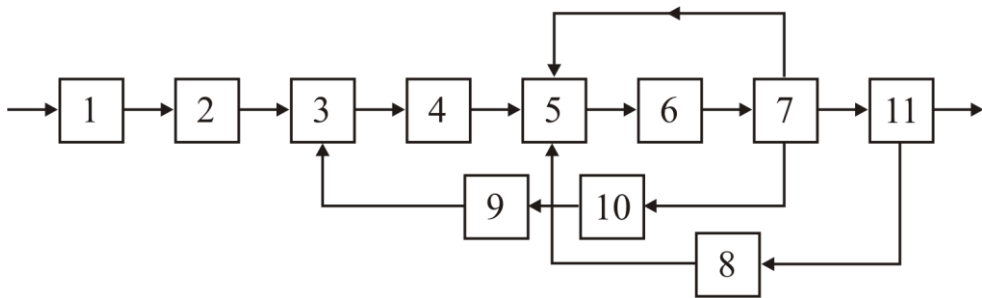
8)



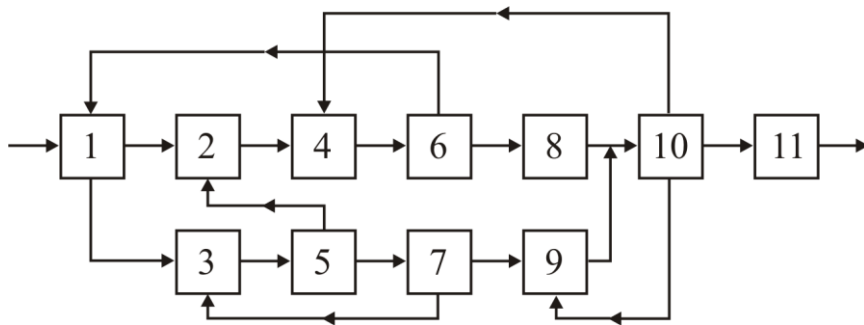
9)



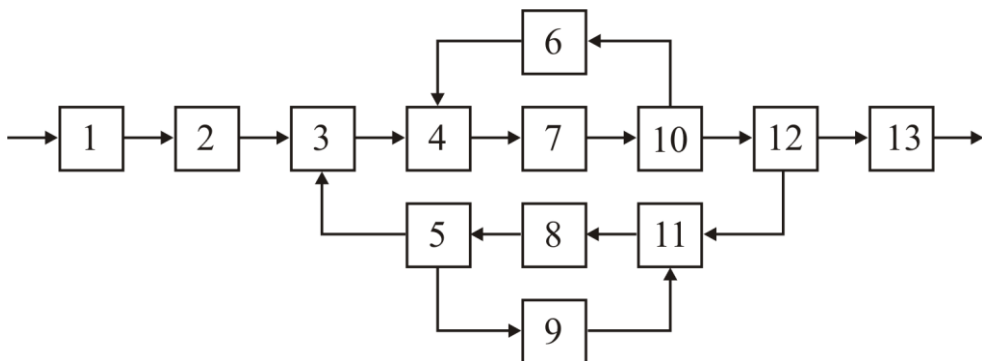
10)



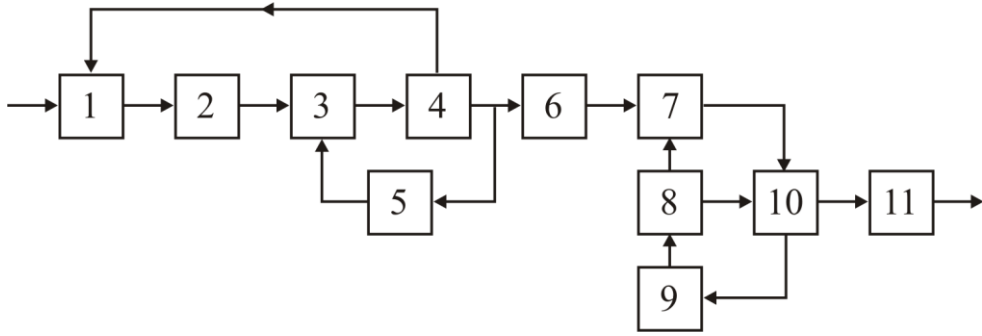
11)



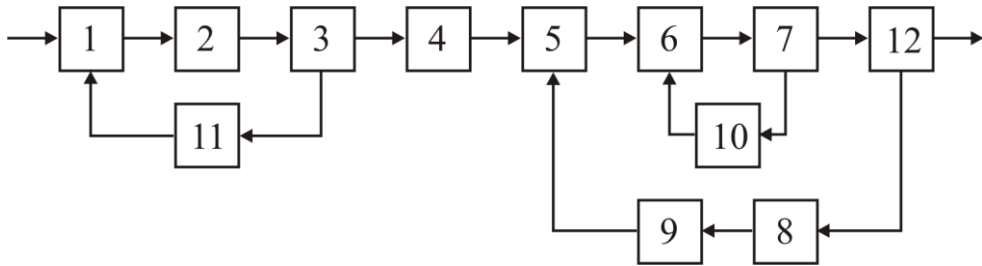
12)



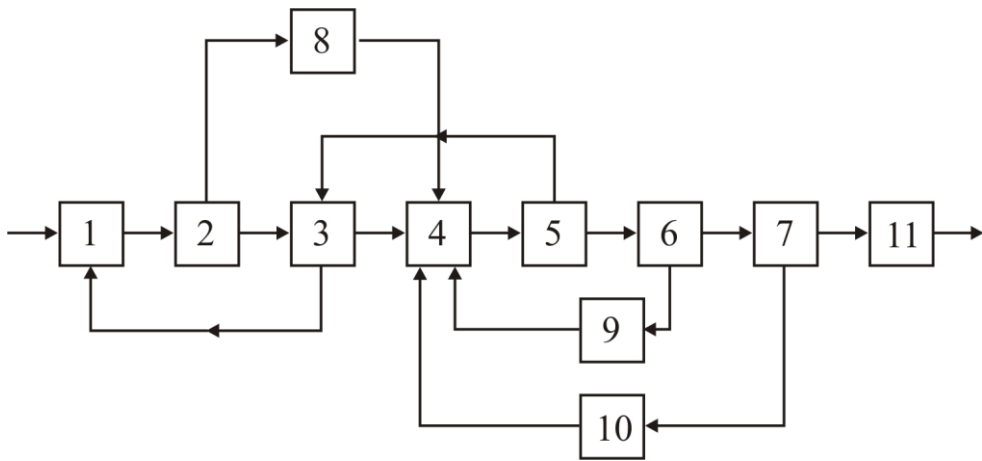
13)



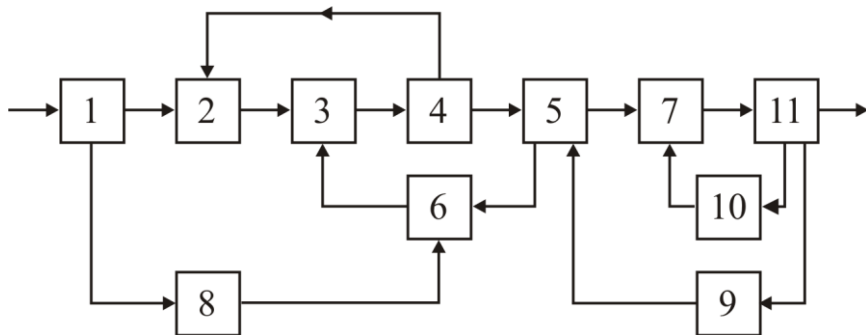
14)



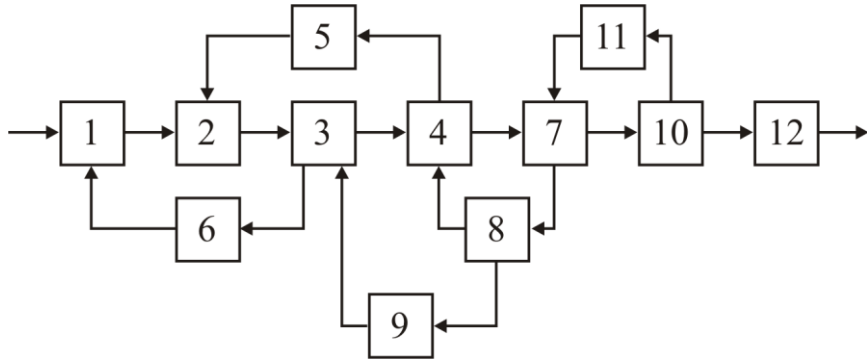
15)



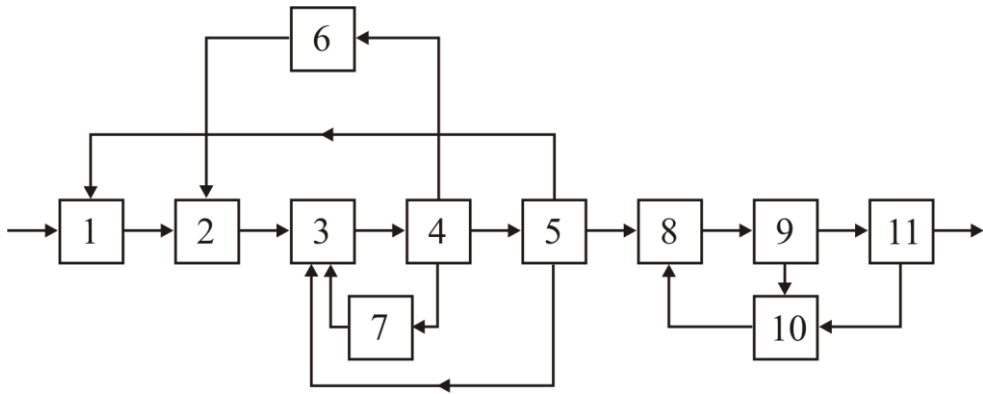
16)



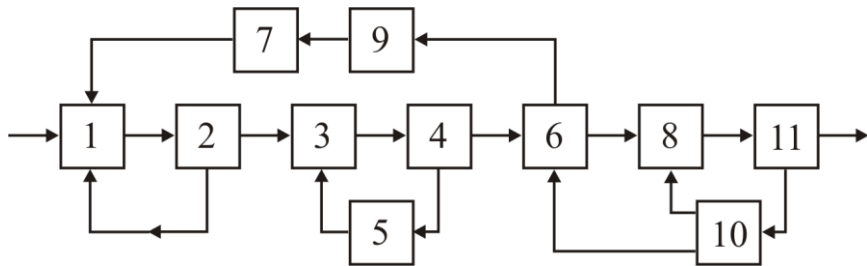
17)



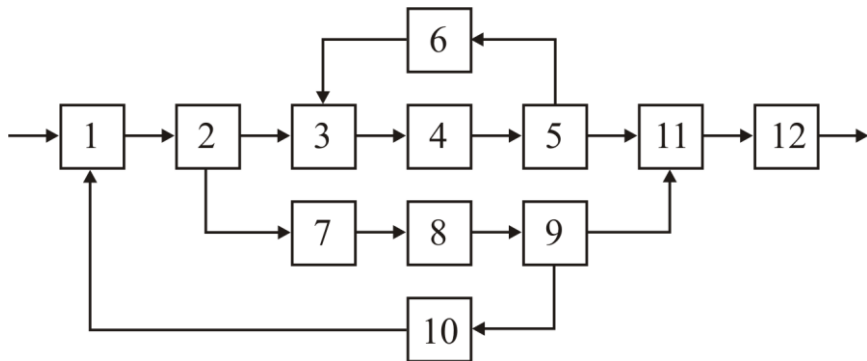
18)



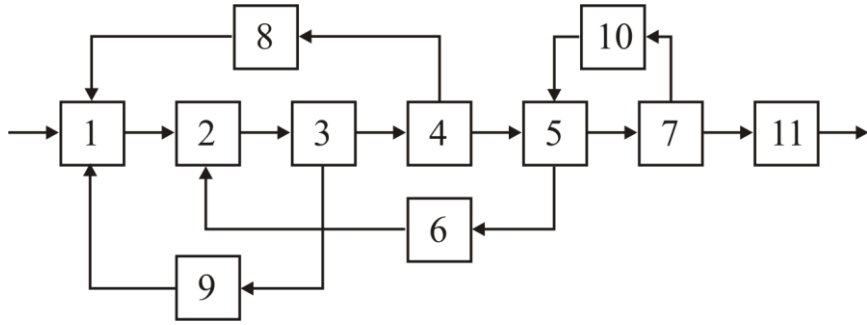
19)



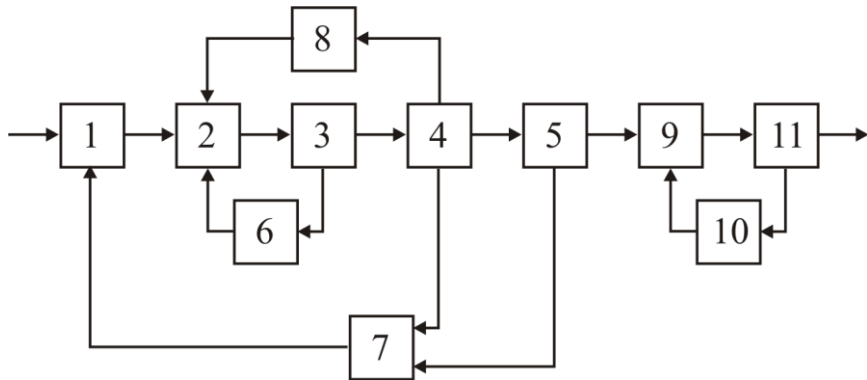
20)



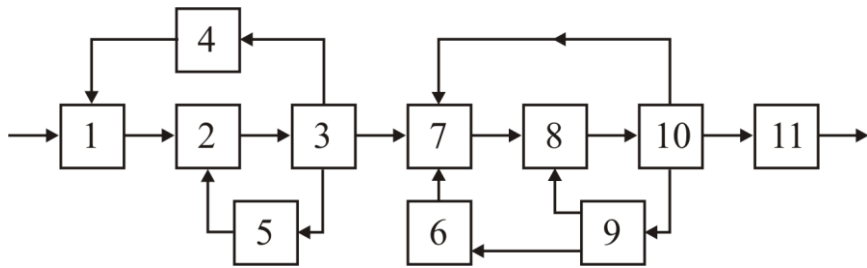
21)



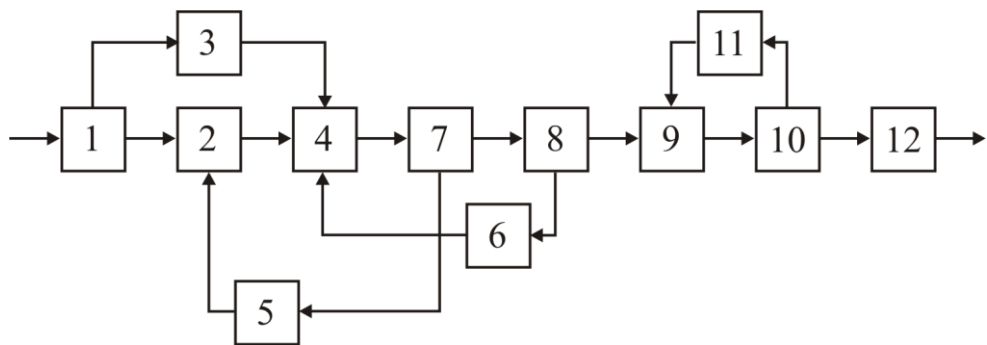
22)



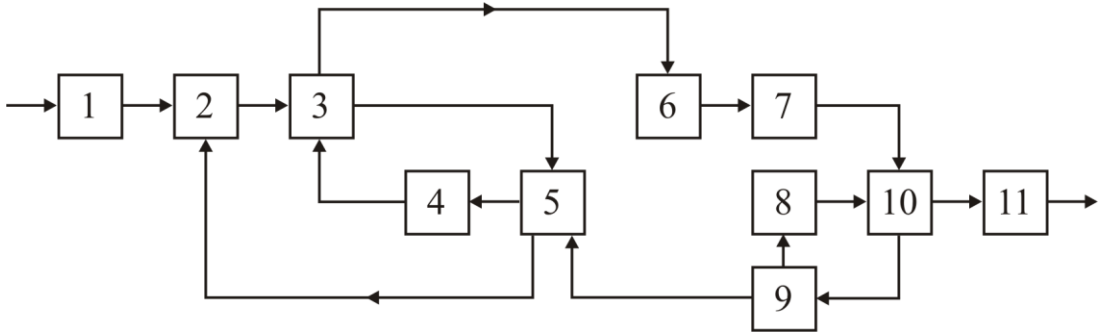
23)



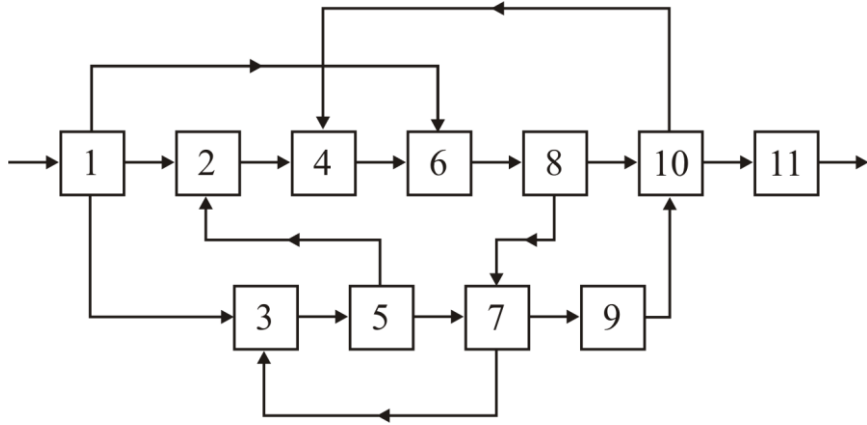
24)



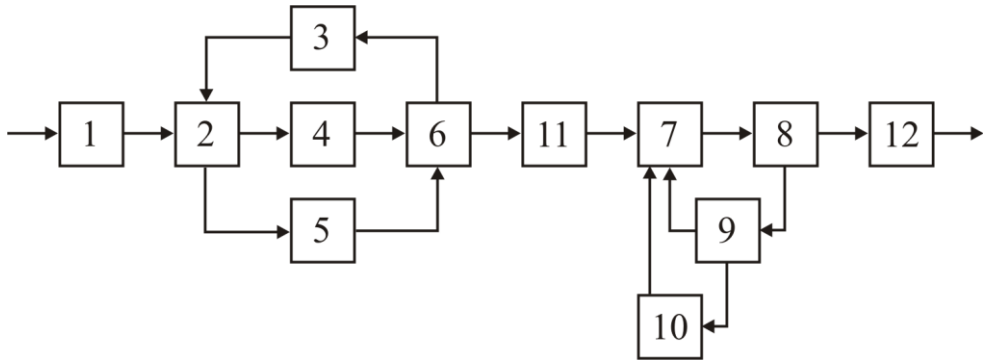
25)



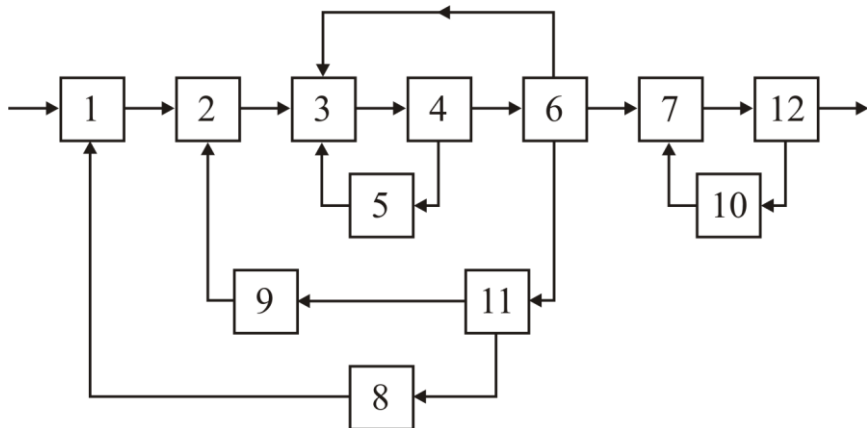
26)



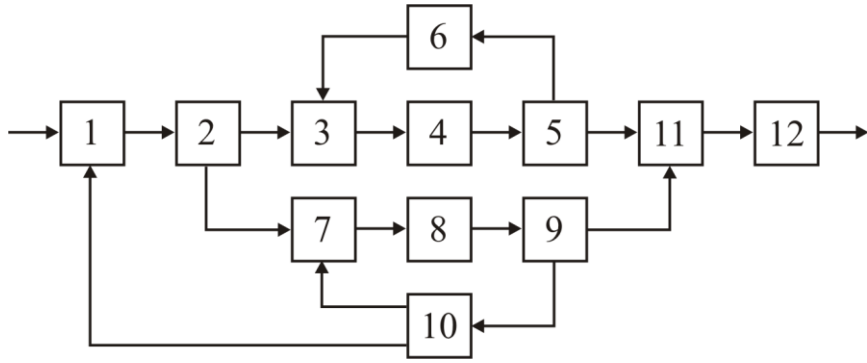
27)



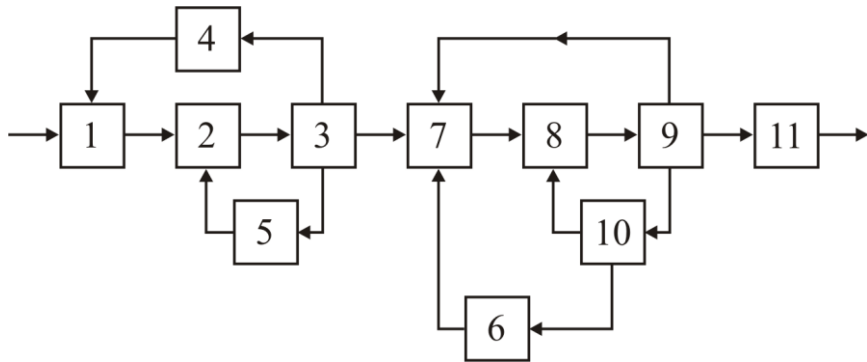
28)



29)



30)



ЛІТЕРАТУРА

1. Л.Р. Ладієва. Оптимізація технологічних процесів.: Навчальний посібник. – К.: НМЦ ВО, 2003. – 209 с.
2. Жалдак М.І. Основи теорії і методів оптимізації: Навчальний посібник/ Жалдак М.І., Триус Ю.В. Черкаси: Брама –Україна, 2005. – 608 с.
3. Загальна хімічна технологія: підручник / В.Т. Яворський, Т.В. Перекупко, З.О. Знак, Л.В. Савчук. Третє видання, доповнене та доопрацьоване. Львів: Видавництво Національного університету «Львівська політехніка», 2014. – 540 с.
4. Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс: Пер. с англ. – М.: Радио и связь, 1988. – 128 с.: ил.
5. Царева З.Н., Орлова Е.И. Теоретические основы химической технологии. – Киев: Вища школа, 1986. – 271 с.
6. Методы и средства автоматизированного расчета химико-технологических систем: Учеб. пособ. для вузов / Н.В.Кузичкин, С.Н.Саутин, А.Е.Путин и др. – Л.: Химия, 1987. – 152 с.
7. Химико-технологические системы. Синтез, оптимизация и управление. / Под ред. Мухленова И.П. Л.: Химия, 1986. – 424 с.