

Міністерство освіти і науки України  
ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ «ОДЕСЬКА ПОЛІТЕХНІКА»

МЕТОДИЧНІ ВКАЗІВКИ  
до курсової роботи по курсу  
«МЕТОДИ АВТОМАТИЗОВАНИХ РОЗРАХУНКІВ ТА ОПТИМІЗАЦІЇ»  
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 курсової роботи по курсу «Методи автоматизованих розрахунків та оптимізації» 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. – 42 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 курсової роботи по курсу «Методи автоматизованих розрахунків та оптимізації».** В методичних вказівках надані рекомендації стосовно структури роботи, вибору математичної моделі каталітичного хімічного реактору та методів оптимізації показників процесу, а також пояснення роботи та інтерфейсу оригінальних прикладних програм, що використовуються для розрахунків за індивідуальними завданнями. Методичні вказівки призначено для здобувачів першого (бакалаврського) рівня вищої освіти за спеціальністю 161 – Хімічні технології та інженерія.*

## ЗМІСТ

ВСТУП -----	4
1. СТРУКТУРА КУРСОВОЇ РОБОТИ-----	5
2. ОБ'ЄКТ ОПТИМІЗАЦІЇ – ТЕХНОЛОГІЧНА СХЕМА ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ ФОРМАЛІНУ -----	6
3. ВИКОНАННЯ РОЗРАХУНКІВ НА ПЕОМ-----	8
3.1. МАТЕРІАЛЬНІ РОЗРАХУНКИ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНОЇ СХЕМИ УСТАНОВКИ ОДЕРЖАННЯ ФОРМАЛІНУ-----	8
3.2. РОЗРАХУНОК ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ТРУБЧАСТОГО РЕАКТОРУ ОКИСЛЕННЯ-----	10
3.3. ПРИКЛАД ВИКОНАННЯ ЗАДАЧІ ОПТИМІЗАЦІЇ РЕАКТОРА-----	13
3.4. РОЗРАХУНОК БЛОКУ КАТАЛІТИЧНОГО ОЧИЩЕННЯ ГАЗОВОГО ВИКИДУ -----	15
3.5. ПРИКЛАД РОЗРАХУНОКУ ПАРАМЕТРІВ БЛОКУ КАТАЛІТИЧНОГО ОЧИЩЕННЯ ГАЗОВОГО ВИКИДУ -----	16
4. ОПТИМІЗАЦІЯ СХЕМИ ЗА ЕКОНОМІЧНИМИ КРИТЕРІЯМИ -----	18
4.1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ -----	18
4.2. МЕТОД КРУТОГО СХОДЖЕННЯ (МЕТОД БОКСА-УІЛСОНА)-----	20
4.3. ПОВНИЙ ФАКТОРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ-----	23
4.3.1. <i>Планування експерименту</i> -----	24
4.3.2. <i>Проведення експерименту на об'єкті дослідження</i> -----	25
4.3.3. <i>Одержання математичної моделі об'єкта</i> -----	25
4.4. ПРИКЛАД ОПТИМІЗАЦІЇ СХЕМИ ЗА ЕКОНОМІЧНИМ КРИТЕРІЄМ -----	26
4.4.1. <i>Пошук оптимальної області</i> -----	26
4.4.2. <i>Розрахунок реактора і схеми в оптимальній області</i> -----	28
4.4.3. <i>Аналіз оптимальної області</i> -----	29
4.4.4. <i>Розрахунок реактора і схеми в оптимальній точці</i> -----	31
4.5. АНАЛІЗ РОБОТИ СХЕМИ ЗА ДОДАТКОВИМИ ПАРАМЕТРАМИ -----	32
5. ОПТИМІЗАЦІЯ СХЕМИ ЗА ЕКОЛОГО-ЕКОНОМІЧНИМИ ПОКАЗНИКАМИ -----	33
5.1. ЗАДАЧА ОПТИМІЗАЦІЇ СХЕМИ ЗА ЕКОЛОГІЧНИМИ ПОКАЗНИКАМИ-----	33
5.2. ОЦІНКА ЕКОЛОГО-ЕКОНОМІЧНОЇ ЕФЕКТИВНОСТІ СИСТЕМ ГАЗООЧИСТКИ-----	34
5.2.1. <i>Розрахунок екологічного ефекту</i> -----	34
5.2.2. <i>Розрахунок витрат на впровадження й економічної ефективності         очисних споруд</i> -----	36
5.3. ПРИКЛАД ОПТИМІЗАЦІЇ СХЕМИ ЗА ЕКОЛОГО-ЕКОНОМІЧНИМ КРИТЕРІЄМ-----	38
5.3.1. <i>Розрахунок параметрів блоку каталітичного газоочищення</i> -----	38
5.3.2. <i>Розрахунок екологічного ефекту</i> -----	38
5.3.3. <i>Економічна ефективність системи газоочистки</i> -----	40
СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ -----	42

## ВСТУП

Основним методом синтезу і дослідження складних технічних систем у даний час стало математичне моделювання, яке спирається на широке застосування ЕОМ. Моделювання окремих елементів і всієї системи використовують як при розробці нових, так і при оптимізації діючих виробництв.

Виконуючи дану курсову роботу з оптимізації складної технічної системи на прикладі хіміко-технологічної схеми з блоком очищення газового викиду, студенти проводять основні розрахунки на ЕОМ, користуючись прикладними програмними модулями розрахунків по математичним моделям хімічних реакторів і технологічної схеми. Таким шляхом студенти закріплюють навички практичного використання методів обчислювальної математики і математичного моделювання, а також банку прикладних програм в інженерних розрахунках, навчаються аналізувати й узагальнювати отримані результати при вирішенні оптимізаційних задач.

У процесі оптимізації схеми вирішуються три задачі. Перша і головна – це оптимізація окремих параметрів схеми з метою поліпшення її техніко-економічних показників. Друга полягає в оптимізації параметрів основного елементу схеми – реактора окислення. Третя задача – це оптимізація схеми за екологічним показником – еколого-економічної ефективності роботи системи газоочищення. Це різні оптимізаційні задачі і вони вирішуються різними методами.

Задача оптимізації схеми за економічними показниками вирішується методом крутого сходження Бокса-Уілсона. Задача оптимізації реактора окислювання вирішується шляхом розрахунку показників реактора для декількох варіантів з різними ступенями перетворення і вибору з них кращого за максимальним виходом. Задача оптимізації схеми за екологічними показниками вирішується шляхом порівняння різних варіантів роботи схеми по еколого-економічній ефективності. Для цього розраховують різні варіанти роботи елементів блоку газоочищення для кожного з розглянутих раніше варіантів роботи схеми.

Кожний студент одержує індивідуальне завдання на курсове проектування. Захист курсової роботи, попередньо підписаної керівником, проводиться у встановлений термін перед комісією, затвердженої на кафедрі. При оцінці курсової роботи враховується обґрунтованість і оригінальність прийнятих рішень, повнота і правильність розрахунків, якість оформлення пояснювальної записки і графічної частини, систематичність роботи і підготовленість студента до захисту.

## 1. СТРУКТУРА КУРСОВОЇ РОБОТИ

Курсова робота складається з пояснювальної записки і графічної частини.

Використовуючи рекомендовану літературу, у теоретичній частині пояснювальної записки курсової роботи необхідно:

- 1) охарактеризувати основні об'єкти оптимізації – технологічну схему установки виробництва формаліну з блоком газоочищення як технічну систему, описати її структуру і основні параметри, у першу чергу ті, що використовуються при оптимізації [1–2];
- 2) описати математичні моделі, що характеризують процеси у тому або іншому апараті, ознайомитись з відповідними програмами для розрахунку та їх алгоритмами, детально описати алгоритм програми “Схема”, для чого виконати аналіз структури основного блоку циклічної схеми, визначити послідовність розрахунків окремих апаратів і навести статистичні моделі елементів, що використані у програмі [3–4];
- 3) дати загальну характеристику методів рішення задач оптимізації й описати методи, використані у роботі [7–9];

Виконуючи курсову роботу, необхідно:

- 1) по початковим даним завдання на проектування, провести розрахунок реактора і схеми в базовій точці і визначити основні технологічні характеристики апарата (час контакту реакційної суміші з каталізатором, необхідний його обсяг, параметри на виході з реактора) та параметри матеріальних потоків схеми; виконуючи розрахунок реактору, треба попередньо провести його параметричну оптимізацію і визначити оптимальний ступень перетворення в умовах заданих обмежень; оптимізація виконується надалі в усіх розрахунках реактору з новими параметрами на вході [12–14];
- 2) для оптимізації схеми за економічними показниками згідно алгоритму метода “крутого сходження”:
  - провести пошук оптимальної області і розрахувати параметри реактора і схеми у визначеній точці оптимальної області ;
  - провести аналіз оптимальної області з метою пошуку оптимальної точки, розрахувати параметри реактора і схеми в оптимальній точці [10–11].
- 3) порівняти за еколого-економічними показниками знайдені вище варіанти роботи схеми (в основній точці, точці оптимальної області й оптимальній точці), для чого визначають параметри апаратів блоку газоочищення – каталітичного реактора і теплообмінника при експлуатації блоку в двох-трьох режимах для кожної точці, для всіх випадків розраховують еколого-економічну ефективність систем газоочищення, що і буде критерієм оптимальності при рішенні даної оптимізаційної задачі і вибору оптимального варіанту [13].

4) проаналізувати отримані результати, порівняти знайдені рішення задачі оптимізації схеми по економічних і екологічних показниках та узагальнити рішення задачі оптимізації схеми, з огляду на обидва критерії оптимізації.

Пояснювальна записка виконується відповідно до вимог, прийнятими в ОНПУ. Вона повинна містити в собі: титульний лист, завдання на курсове проектування, реферат, зміст, вступ, основну частину, висновки, список використаної літератури, додатки (при необхідності).

Вступ повинен підкреслити актуальність теми, коротко характеризувати сучасний стан технічної проблеми, якій присвячено курсову роботу, обрані напрямки розробки і методи.

У тексті основної частини, що розбивається на розділи і підрозділи, викладаються теоретичні відомості з навчальної літератури та результати самостійної роботи згідно вище наведеної структури. Особливу увагу варто приділити опису розрахунків, проведених на ЕОМ, чітко формулювати ціль кожного з розрахунків, докладно описувати порядок їхнього проведення й аналіз отриманих результатів. Кожний розділ завершується висновками.

У висновках до пояснювальної записки необхідно підкреслити, що визначено при виконанні всієї курсової роботи, і оцінити ступінь виконання завдання на проектування.

Обсяг пояснювальної записки – 35–50 листів.

Графічна частина курсової роботи включає схеми, графіки і таблиці (спрощена технологічна схема установки з блоком газоочищення, розрахункова схема, схема основного апарата, графіки, що ілюструють пошук оптимуму методом крутого сходження, таблиці з параметрами схеми для основного й знайдених варіантів і ін.), виконується окремо на листах встановлених форматів загальним обсягом по формату А1.

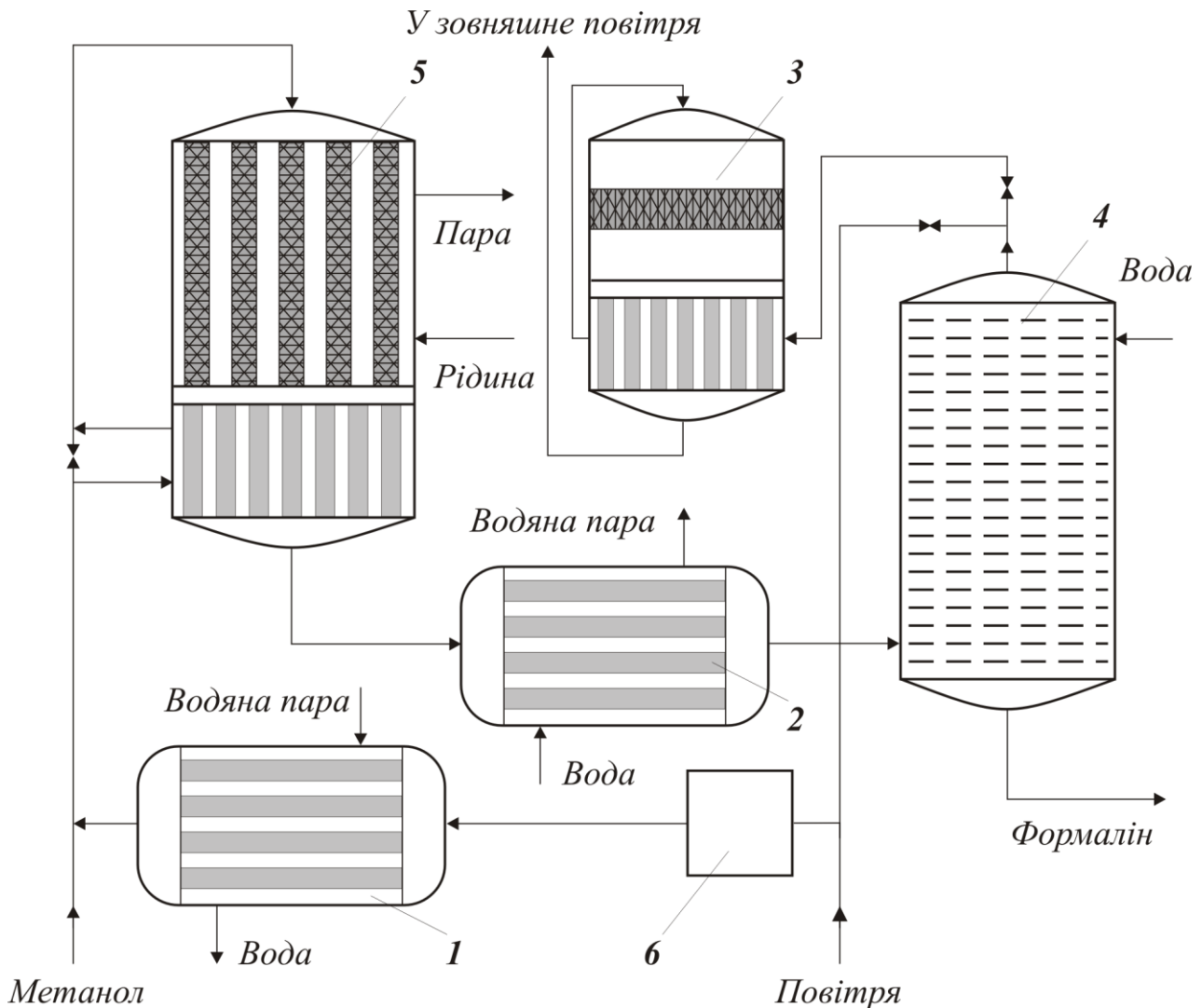
## **2. ОБ'ЄКТ ОПТИМІЗАЦІЇ – ТЕХНОЛОГІЧНА СХЕМА ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ ФОРМАЛІНУ**

Схема одержання формальдегіду окислюванням метанолу на оксидних катализаторах приведена на рис.1.

Газодувка подає рециркулюючий потік газової суміші до схеми. У цей потік газової суміші через розподільний пристрій добавляють свіже повітря до досягнення необхідної концентрації кисню, насичують метанолом, доводячи його зміст у газі до завданого значення. Підтримка певної концентрації суміші дуже важлива для забезпечення вибухонебезпеки і нормального перебігу процесу.

Спиртово-повітряна суміш проходить теплообмінник 1, у підконтактному теплообміннику нагрівається до необхідної температури і надходить на вхід у реактор окислення, у трубках якого знаходиться катализатор. Частина теплоти,

що виділяється в результаті хімічної реакції, знімається в реакторі за допомогою хладоагенту, що знаходиться у міжтрубному просторі.



**Рис. 1.** Технологічна схема процесу окислювання метанолу:

1, 2 – теплообмінники; 3 – блок каталітичного очищення (з реактора та рекуператора; 4 – абсорбційна колона; 5 – реактор окислювання метанолу; 6 – газодувка

Гарячі реакційні гази після реактора попадають у підконтактний теплообмінник, де відбувається швидке охолодження реакційної суміші і запобігається розпад формальдегіду. Охолодження здійснюється за допомогою свіжої метанола-повітряної суміші, яка нагрівається до потрібної температури на вході в реактор окислення.

Охолоджені у теплообміннику 2 реакційні гази надходять в абсорбер, виконаний у виді тарілчастої колони. Абсорбер зрошують такою кількістю води, щоб у кубі вийшов 36–37%-ний формалін. В абсорбері поглинається переважно формальдегід. Більша частина газу, що відходить з абсорбера, йде на

рециркуляцію, а інша кількість проходить блок каталітичного очищення і скидається в атмосферу.

Як технічна система, технологічна схема характеризується, крім структури, параметрами елементів (апаратів) і зв'язків – потоків, що з'єднують апарати. У курсовій роботі розраховують реактори окислювання і газоочистки, а також схему за допомогою відповідних прикладних програм. Деякі параметри елементів і схеми використовуються у програмах, як початкові данні, інші є результатами розрахунків. Їх слід визначити і навести у тексті пояснювальної записки.

### **3. ВИКОНАННЯ РОЗРАХУНКІВ НА ПЕОМ**

Для виконання розрахунків на ПЕОМ використовуються програмні комплекси «COMPLEX1.EXE» і «GAZO.EXE».

COMPLEX1.EXE – програмний комплекс, призначений для розрахунку трубчастого та адіабатичного реакторів процесу одержання формальдегіду з метанолу на окисних каталізаторах, для розрахунку підконтактного теплообмінника інтервальним методом і самої схеми виробництва формаліну. Він містить у собі такі програми:

- «Адіабатичний реактор»
- «Трубчастий реактор»
- «Підконтактний теплообмінник»
- «Схема».

GAZO.EXE – програмний комплекс, який дає можливість розрахувати концентраційні і температурні поля в адіабатичному шарі каталізатора і визначати технологічні параметри роботи реактора для очищення газових викидів в стаціонарних умовах. Він дозволяє розраховувати параметри процесу для 18 різноманітних речовин.

Програмні комплекси не мають графічних засобів для наочного зображення залежностей, наприклад, показу профілю температур у реакторах, що розраховуються. Робота з мишею також не передбачена.

Обидва комплекси знаходяться в директорії LABS.

#### **3.1. МАТЕРІАЛЬНІ РОЗРАХУНКИ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНОЇ СХЕМИ УСТАНОВКИ ОДЕРЖАННЯ ФОРМАЛІНУ**

Під хіміко-технологічною системою (ХТС) розуміють сукупність елементів – 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. У якості елементів ХТС, як



правило, виділяють окремі апарати і машини, що виконують задану функцію, і в даному проводимому дослідженні є неподільними. При виконанні матеріального розрахунку схем використовується математична модель схеми, яка складається з моделей окремих елементів та рівнянь потоків, що зв'язують елементи.

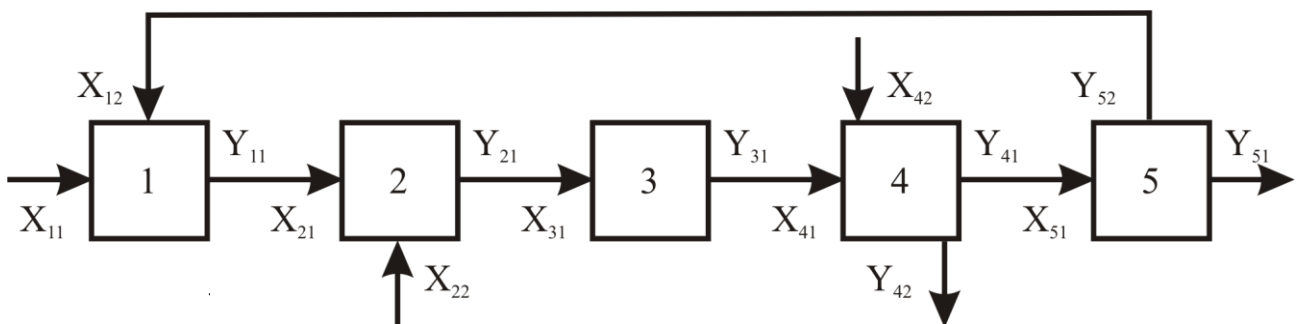
Для розрахунку ХТС не можна запропонувати один універсальний алгоритм, тому що кожна схема – це унікальна складна технічна система з визначеною структурою і з характерними зв'язками між елементами. При складанні алгоритму розрахунку хіміко-технологічної схеми необхідно вирішити наступні задачі аналізу структури даної схеми: визначити і виділити комплекси в ХТС; визначити попередню послідовність розрахунку комплексів і елементів, що не входять у комплекси; для кожного комплексу визначити оптимальну множину розриваючих дуг та послідовність його розрахунку; визначити остаточну послідовність розрахунку схеми. Методика аналізу структури схеми розглядається у теоретичній частині дисципліни і при виконанні лабораторних робіт [11].

Для розрахунку матеріальних потоків основного блока циклічної схеми установки одержання формаліну (рис. 2) використано метод послідовного ітераційного рахунку, реалізований у прикладній програмі «СХЕМА».

Введення вхідної інформації здійснюється з головної панелі.

Перелік вхідних даних програми «СХЕМА»:

- продуктивність установки по формаліну, тис.т/рік;
- безрозмірні параметри хімічного процесу в реакторі – ступінь перетворення і селективність;
- концентрації продуктів у потоку на вході в реактор для метанолу, кисню і води, моль/м<sup>3</sup>.



**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 статистичних математичних моделей усіх елементів схеми враховані при складанні програми у вигляді констант, значення яких відповідають показникам діючого виробництва. Математичні моделі елементів

схеми вивчаються у теоретичній частині дисципліни та при виконанні лабораторних робіт. У курсовій роботі треба навести статистичні математичні моделі елементів основного блоку схеми, самостійно виконати аналіз його структури і описати алгоритм матеріального розрахунку.

### 3.2. РОЗРАХУНОК ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ТРУБЧАСТОГО РЕАКТОРУ ОКИСЛЕННЯ

Для моделювання каталітичного трубчастого реактору окислення метанолу використовується двохпараметрична детермінірована математична модель, яка також вивчається при виконанні лабораторних робіт [14], у розрахунках використовується програма “Трубчастий реактор”.

Для вибору всіх параметрів реактору потрібно виконати великий обсяг розрахунків на ЕОМ, тому в курсовій роботі обмежують число параметрів, що підбирається. Рекомендується у якості керуючих параметрів прийняти середню температуру зовнішнього теплоносія  $T_{хл}$  та швидкість суміші в трубках  $\omega_0$ . 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  $C_{i0}$ ) 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.

Приступаючи до розрахунку, потрібно перевірити, щоб обрані діаметри трубки і зерна каталізатора задовольняли умові, при якій поле швидкостей у трубці буде достатньо однорідним:

$$6 \leq d_{тр} / d_з \leq 4 \quad (3.1)$$

Спочатку краще вибрати параметри по температурі “гарячої точки” – максимальній температурі в трубці для екзотермічних процесів  $T_{г.т.}$ , що повинна бути близькою до максимально допустимої за умовами 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. По отриманих парах  $T_{хл}-T_{г.т.}$  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 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  $\Delta P$  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.

У 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 параметру, тобто вирішити задачу оптимізації реактору.

Постановка задач оптимізації включає наступні питання [9]:

- 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'єкту оптимізації

$$Y = F(X, U)$$

де  $X$  – вектор вхідних параметрів,  $U$  – вектор керуючих параметрів об'єкту 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 та оптимізуються і при яких  $Y$  приймає максимальне чи мінімальне значення при виконанні усіх додаткових умов і заданих обмеженнях.

Критерій оптимальності і параметри, що оптимізуються, 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 параметр, що змінюється та оптимізується.

Оптимізація реактора окислювання метанолу, як і інших хімічних реакторів, може бути виконана по одному 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.

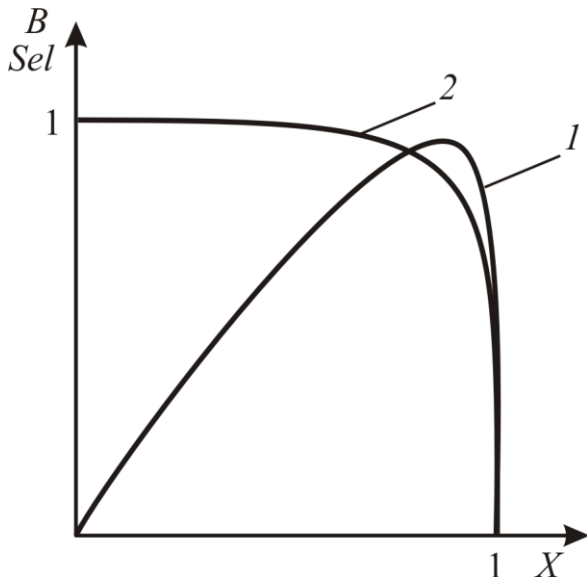
Вихід легко розраховується по формулі

$$B = X \cdot Sel, \tag{3.2}$$

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 ступеню перетворення (рис. 3).



**Рис. 3.** Залежність між виходом проміжного продукту (формальдегіду) і ступенем перетворення вихідної речовини (метанолу) (1), селективністю і ступенем перетворення (2)

Максимальне значення виходу досягається тільки при ступені перетворення 0,995–0,999, тому в трубчастих реакторах, що працюють в інтервалі 0,968–0,975 максимум виходу не завжди досягається.

При виконанні роботи селективність при конкретному значенні ступеню перетворення визначають з результатів розрахунків реактора за допомогою програми “Трубчастий реактор” для заданого ступеня перетворення, тобто

$$\text{Sel} = f(P_{\text{вх}}, X) \quad (3.3)$$

де  $P_{\text{вх}}$  – вхідні параметри програми того чи іншого розрахунку.

Цю залежність не можна навести у вигляді рівняння, але вона існує як математична модель трубчастого каталітичного реактору, що є системою диференціальних рівнянь.

У такому випадку цільову функцію не можна скласти у вигляді рівняння на підставі (3.2), але її можна розглядати у загальному вигляді

$$B = F(P_{\text{вх}}, X) \quad (3.4)$$

Функція є багатопараметричною і це значно ускладнює рішення оптимізаційної задачі, але якщо її виконувати з незмінними вхідними параметрами, змінюючи тільки один – ступень 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 в такий спосіб – 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 ( $T_{\text{хл}}$ ,  $\omega$ ) доводиться дещо змінювати для різних  $X$ , щоб виконати обов’язкові технологічні вимоги завдання. Таким чином, рішення задачі оптимізації реактору знаходиться при визначених додаткових обмеженнях значень параметрів реактору 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 по температурі в шарі каталізатора і гідравлічному 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 реактору із трьома – п'ятьма ступенями перетворення з заданої області його можливих значень і вибору оптимального ступеня перетворення за найбільшим значенням критерію оптимальності – виходу формальдегіду. Технологічні параметри для кожного варіанту підбирають при розрахунку реактора за допомогою програми “Трубчастий реактор” з обов'язковим виконанням умов оптимальності температурного режиму і заданих обмежень.

### 3.3. ПРИКЛАД ВИКОНАННЯ ЗАДАЧІ ОПТИМІЗАЦІЇ РЕАКТОРА

#### Вихідні дані:

– продуктивність по формаліну	120 тисяч тон на рік
– концентрації компонентів на вході в реактор:	
Метанол	3,2 моль/м <sup>3</sup>
Кисень	3,9 моль/м <sup>3</sup>
Вода	0,9 моль/м <sup>3</sup>
Формальдегід	0 моль/м <sup>3</sup>
– внутрішній діаметр трубки	0,030 м
– максимальна температура в шарі каталізатора	365°C
– перепад тиску в реакторі	0,03 МПа
– співвідношенню концентрацій кисню і метанолу на вході у реактор	не менше 1.1
Параметри, що рекомендуються (діапазони):	
– лінійна швидкість суміші	1,3 - 2,2 м/с
– діаметр зерна каталізатора	3–6 мм
– ступінь перетворення на виході	96,8–97,5 %
– температура холодоагенту	220–290°C
– температура суміші на вході	160–190°C
– пористість шару каталізатора	0,40–0,42

У цьому та інших прикладах показано хід виконання роботи, текст пояснень максимально скорочено, не описані методики розрахунків та аналізу їх результатів. У курсовій роботі це повинно бути описано докладно, особливо аналіз і вибір результатів при розрахунках на ЕОМ на кожному етапі. Оптимізація виконана без заміни каталізатора в реакторі, але це можна робити при переході до точки оптимальної області і далі до оптимальної точки.

Діаметр зерна каталізатора вибираємо з урахуванням рекомендації (3.1).

При заданому  $d_{\text{тр}}=30$  мм діаметр зерна може бути 5÷6 мм. З урахуванням вимоги оптимальності реактора та обмежень зупиняємося на більш дрібному зерні з діаметром 5 мм.

Для інших параметрів немає рекомендацій, тому з заданих інтервалів обираємо: температуру суміші на вході – 170 °С; пористість шару каталізатору – 0,42.

Температура холодоагенту і швидкість суміші будуть знайдені в ході розрахунків з урахуванням вимоги оптимальності температурного режиму і обмеження по гідравлічному опору. При необхідності значення цих параметрів можуть вийти з рекомендованого інтервалу.

Оптимальне значення ступеня перетворення має бути знайдено при рішенні задачі оптимізації реактора окислювання.

Розрахунок і оптимізацію проводимо по запропонованим вище методикам (розділ 3.2) за допомогою програми “Трубчастий реактор”.

З метою оптимізації виконуємо три серії розрахунків реактору з ступенями перетворення 0,968, 0,972, 0,975 при можливому відхиленні  $\pm 0,001$ . У кожній серії змінюємо температуру холодоагенту і швидкість суміші у трубці, поки не одержимо результат, що цілком задовольняє вимозі оптимальності температурного режиму ( $T_{\text{max}} \approx T_{\text{доп}} = 365 \pm 2^\circ\text{C}$ ) і обмеженню ( $\Delta p \approx \Delta p_{\text{доп}} = 0,03 \text{ МПа} \pm 0,001 \text{ МПа}$ ). Результати остаточних розрахунків для кожної серії попередніх розрахунків наведені в табл. 3.1.

**Таблиця 3.1**

*Результати розрахунків у базовій точці*

№	$\omega$ , м/с	$T_{\text{хл}}$ , °С	$T_{\text{г.т}}$ , °С	X, частки	SeI, частки	$\tau_k$ , с	$\Delta P$ , МПа	Вихід, %
1	1,45	234	364,6	0,968	0,947	1,069	0,030	91,67
2	<b>1,40</b>	<b>233</b>	<b>366,2</b>	<b>0,975</b>	<b>0,941</b>	<b>1,250</b>	<b>0,031</b>	<b>91,74</b>
3	1,42	234	365,3	0,972	0,943	1,158	0,029	91,66
Оптимальний результат з трьох остаточних серій розрахунків ( при $C_B=0,611$ )								
4	1,40	233	363,0	0,975	0,940	1,250	0,031	91,55

Порівняння цих варіантів дозволяє знайти оптимальний ступінь перетворення в реакторі окислювання для заданого інтервалу  $X_{\text{опт}} = 0,975$ .

Це значення знайдене з обмеженнями, тобто при зазначених вище параметрах реактора – заданих концентраціях компонентів на вході, діаметрі трубок 30 мм, розмірі зерна каталізатора 5 мм, температурі на вході 170°С, температурі холодоагенту 233 – 234°С і швидкості суміші на вході в трубку 1,40 – 1,45 м/с, що дозволяють не порушити обмеження з завдання у кожному випадку.

У курсовій роботі пошук  $X_{\text{опт}}$  рекомендується проілюструвати графіком ступень перетворення-вихід, оптимальність температурного режиму – графіком у координатах  $T=f(L_{\text{тр}})$  для обраного варіанта.

Використовуючи вихідні параметри реактора  $X_{\text{опт}} = 0,975$  і  $S_{\text{el}} = 0,941$ , розраховують схему по програмі “Схема”. У результаті розрахунків одержують повідомлення про необхідність повторити розрахунок реактора з концентрацією води на вході в реактор  $0,611$  моль/м<sup>3</sup>.

Повторюємо розрахунки для оптимізації реактора знову, результати остаточних розрахунків приведені в табл. 3.1 тільки для оптимального ступеня перетворення також рівного  $0,975$  у цьому випадку.

З параметрами реактора при  $X_{\text{опт}}=0,975$  розраховують схему і з результатів визначають необхідні для подальшої роботи параметри схеми у базовій точці (табл. 3.2).

В здувці (газова суміш, що спрямовується на блок каталітичного газоочищення) вміст CO складає  $11,4/545,7 = 0,02034$  мольних часток.

Таблиця 3.2

*Параметри потоків схеми*

<b>Потік</b>	<b>кмоль/год</b>
Мольний потік метанолу на вході ( $x_{22}$ )	194
Сумарний мольний потік суміші на вході в реактор ( $x_{31}$ )	2718,7
Сумарний мольний потік суміші на виході реактора ( $y_{31}$ )	2819,0
Сумарний мольний потік рециклу ( $y_{52}$ )	1892,7
Сумарний мольний потік здувки ( $y_{51}$ )	545,7
у тому числі оксид вуглецю	11,4

Ці параметри дозволяють легко розрахувати усі об’ємні потоки схеми при нормальних умовах і далі завантаження каталізатора у трубках реактора. Додаткові параметри наведені в табл. 3.3 та 4.10.

### 3.4. РОЗРАХУНОК БЛОКУ КАТАЛІТИЧНОГО ОЧИЩЕННЯ ГАЗОВОГО ВИКИДУ

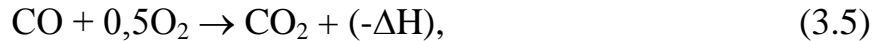
Основними елементами блоку газоочищення є реактор каталітичного газоочищення і теплообмінник-рекуператор.

Технологічні параметри реактора розраховують за допомогою програми GAZO, параметри теплообмінника оцінюють приблизно.

При моделюванні каталітичних шарів адіабатичного реактора застосовується відповідна математична модель ідеального витиснення [14]. Для рішення системи диференціальних рівнянь обраний метод Рунге-Куты.

Газова суміш, яку потрібно очистити, з необхідною температурою надходить у реактор з адіабатичним шаром каталізатора. На виході із шару температура не повинна перевищувати максимально припустиму за умовами термостійкості каталізатора. Далі гаряча очищена суміш нагріває вхідну до необхідної температури в теплообміннику-рекуператорі.

Процес очищення газових викидів від оксиду вуглецю проводять на окісному мідно-хромовому каталізаторі ІКТ-12-8, де протікає необоротна екзотермічна реакція:



Припустимий інтервал робочої температури для цього каталізатора 250–700°C.

За результатами розрахунку на ЕОМ підбирають параметри роботи шару каталізатора – температуру суміші на вході ( $T_{\text{вх}}$ ) і час контакту ( $\tau_{\text{к}}$ ), при яких досягається потрібний ступінь очистки і виконуються умови по термостійкості каталізатора, коли максимальна температура на виході не перевищує припустиму.

При виконанні першого розрахунку полів концентрації і температури використовується орієнтований час контакту для адіабатичного шару. Його варто задавати в цьому розрахунку свідомо більшим, ніж потрібно, наприклад, 0,5–1,0 с. Виконавши черговий розрахунок, уточнюють величину часу контакту. Такий підхід дозволяє швидко і точно визначати параметри роботи шару каталізатора. Розрахунок кожного наступного варіанта потрібно виконувати, проаналізувавши результати попереднього. Якщо для розглянутого варіанта температура в адіабатичному шарі перевищує потрібну, необхідно продовжити розрахунки варіантів, зменшуючи вхідну температуру, а якщо температура в шарі виявляється нижче потрібної – збільшити вхідну.

Реактор може працювати в різних температурних режимах: низькотемпературному, коли температура входу близька до мінімально припустимої ( $T_{\text{вх}}=250\text{--}300^\circ\text{C}$ ), високотемпературному, коли максимальна температура на виході близька до припустимої ( $T_{\text{вих}}=650\text{--}700^\circ\text{C}$ ) і середньотемпературному, коли середня температура шару дорівнює середній температурі припустимого інтервалу.

Поверхню теплопередачі у теплообміннику-рекуператорі визначають для знайдених температур на вході та виході реактора газоочищення.

Таким чином, від обраного режиму реактора газоочищення значною мірою залежать економічні показники роботи системи газоочищення і усього виробництва.

### **3.5. ПРИКЛАД РОЗРАХУНОКУ ПАРАМЕТРІВ БЛОКУ КАТАЛІТИЧНОГО ОЧИЩЕННЯ ГАЗОВОГО ВИКИДУ**

Розглянемо розрахунок елементів блоку каталітичного очищення для базової точці. З метою оптимізації знайдемо параметри для трьох можливих режимів роботи реактора газоочищення – низькотемпературний (НТ) з  $T_{\text{вх}}=300\pm 5^\circ\text{C}$ , високотемпературний (ВТ) з  $T_{\text{вих}}=700\pm 5^\circ\text{C}$  і середньотемпературний (СТ) з  $T_{\text{ср}}$  близько  $500^\circ\text{C}$ .



Програма GAZO дає можливість, моделюючи каталітичний процес глибокого окислювання, знайти необхідний час контакту ( $\tau$ , с) для досягнення прийнятого ступеня очищення  $99,5 \pm 0,1\%$ .

Кількість каталізатора розраховують по формулі:

$$V_k = \tau_k \cdot V_{cd}, \quad (3.6)$$

де  $V_{cd}$  – об'ємна витрата здувки, що направляється на очищення,  $\text{м}^3/\text{с}$ .

Обсяг реактора газоочищення знаходять з урахуванням коефіцієнта заповнення, рівного 0,7:

$$V_{ГО} = V_k / 0,7. \quad (3.7)$$

Для оцінки необхідної поверхні теплообмінника-рекуператора виконують орієнтований розрахунок [13].

Температурна схема теплообмінника:

гарячий потік після реактора газоочищення  $t_{\text{вих}} \rightarrow t_{\text{кін}}$ ;

холодний потік, що направляється в реактор  $t_{\text{вх}} \leftarrow t_{\text{нач}}$ ,

де  $t_{\text{вх}}$  і  $t_{\text{вих}}$  – температури на вході і виході реактора газоочищення,  $^{\circ}\text{C}$ ;

$t_{\text{нач}} = 15 \div 25^{\circ}\text{C}$  – температура потоку здувки, що направляється на очищення;

$t_{\text{кін}}$  – температура очищеного потоку здувки на викиді в атмосферу,  $^{\circ}\text{C}$ .

З урахуванням утрат тепла (3%):

$$t_{\text{кін}} = t_{\text{вих}} - (t_{\text{вх}} - t_{\text{нач}}) \cdot 1,03. \quad (3.8)$$

Середні температури теплоносіїв у теплообміннику:

Гарячий потік  $t_{\text{ср, гар}} = (t_{\text{вих}} + t_{\text{кін}}) / 2$ ;

Холодний потік  $t_{\text{ср, хол}} = (t_{\text{вх}} + t_{\text{нач}}) / 2$ .

Середня різниця температур:

$$\Delta t_{\text{ср}} = t_{\text{ср, гар}} - t_{\text{ср, хол}}. \quad (3.9)$$

Теплове навантаження теплообмінника чи кількість тепла, передана від гарячого до холодного теплоносія, знаходять з рівняння теплового балансу

$$Q = G_{cd} \cdot C_{cm} \cdot \Delta t_{\text{гор}} / 1,03 = G_{cd} \cdot C_{cm} \cdot \Delta t_{\text{хол}}, \quad (3.10)$$

де  $G_{cd} = V_{cd} \cdot \rho = V_{cd} \cdot 1,29$ ,  $\text{кг}/\text{с}$  – масовий потік здувки (значення густини здувки прийнято по повітрю);  $C_{cm}$  – середня теплоємність суміші ( $C_{cm} = 1000$   $\text{Дж}/(\text{кг}\cdot\text{K})$  – по повітрю).

Орієнтоване значення коефіцієнта теплопередачі ( $K$ ) для таких теплообмінників може бути прийнято  $10$   $\text{Вт}/(\text{м}^2\cdot\text{K})$ .

Необхідну поверхню теплопередачі знаходять по основному рівнянню теплопередачі:

$$F = Q / (K \cdot \Delta t_{\text{ср}}), \text{ м}^2. \quad (3.11)$$

Результати розрахунків устаткування системи газоочищення приведені в табл. 3.3

**Таблиця 3.3**

*Результати розрахунків устаткування системи газоочищення у базовій точці*

Параметри устаткування	
Об'ємний потік здувки, $\text{м}^3/\text{с}$	3,396
Вміст CO в здувці, % об	2,034

Продовження таблиці 3.3

Режим роботи	НТ	СТ	ВТ
Реактор газоочищення			
Температури, °С:			
на вході	300	410	510
на виході	484,2	594,2	694,2
Ступінь очистки (X)	0,9950	0,9950	0,9951
Час контакту, с	1,43	0,643	0,374
Об'єм каталізатору, м <sup>3</sup>	4,856	2,183	1,270
Об'єм реактора газоочищення, м <sup>3</sup> .	6,938	3,119	1,814
Теплообмінник			
Температура, °С:			
t <sub>кін</sub>	195,8	192,5	189,5
t <sub>ср, гор</sub>	340,0	393,4	441,9
t <sub>ср, хол</sub>	160,0	215	265
Середня різниця, °С	180,0	178,4	176,8
Теплове навантаження, кВт	1226,4	1708,3	2146,3
Поверхня, м <sup>2</sup>	681,4	957,8	1213,6

## 4. ОПТИМІЗАЦІЯ СХЕМИ ЗА ЕКОНОМІЧНИМИ КРИТЕРІЯМИ

### 4.1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

При виконанні цієї оптимізаційної задачі для матеріальних розрахунків використовується програма “Схема”. Вирішують задачу пошуку оптимальних параметрів схеми за тим же загальним планом, що і попередню.

Цільова функція повинна мати той же загальний вигляд

$$Y = F(X, U), \quad (4.1)$$

де  $X$  – вектор вхідних параметрів та  $U$  – вектор керуючих параметрів об'єкту оптимізації.

Маючи цільову функцію, вибирають метод оптимізації і знаходять значення  $U$ , при яких  $R$  досягає екстремуму. При цьому використовують задані обмеження

$$\begin{aligned} X_{\min} &\leq X_{\text{доп}} \leq X_{\max}; \\ U_{\min} &\leq U_{\text{доп}} \leq U_{\max}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Параметри, що оптимізуються,  $U_{\text{опт}}$  повинні відповідати відомим вимогам.

При оптимізації технологічних схем критерієм оптимальності треба обирати економічні показники, за якими можна дати оцінку роботи схеми в цілому. Одним з найважливіших економічних показників виробництва є заводська собівартість цільового продукту (**СВ**). Вона складається з різних видів виробничих і невиробничих витрат. Мінімум собівартості – це один з

головних економічних критеріїв оптимальності виробництва. Повний розрахунок собівартості продукту являє собою досить складну задачу економічного характеру, тому часто обмежуються задачею оптимізації схеми по окремим складовим собівартості. При цьому беруть до уваги тільки найважливіші перемінні витрати, на які безпосередньо впливають досліджувані параметри схеми ( $\Sigma CB_{пер}$ ). Витрати по інших статтях собівартості приймаються умовно постійними ( $\Sigma CB_{пост}$ ).

Заводська собівартість

$$CB = \Sigma CB_{пост.} + \Sigma CB_{пер.} \quad (4.3)$$

Мінімум заводської собівартості (CB) досягається при зниженні суми перемінних витрат ( $\Sigma V_{пер}$ ), які визначають  $\Sigma CB_{пер}$ . Такий підхід значно спрощує розрахунки економічного критерію оптимальності.

Для циклічної схеми, що оптимізується, одержання формаліну можна обмежитися перемінними витратами на повернення рецикла ( $V_{рец}$ ) і на каталітичне очищення здувки від оксиду вуглецю перед викидом в атмосферу ( $V_{сд}$ )

$$\Sigma V_{пер} = V_{рец} + V_{сд} \quad (4.4)$$

Виділені годинні витрати пропорційні об'ємним потокам рецикла ( $V_{рец}$ ) і здувки ( $V_{сд}$ ). Для їхнього визначення необхідно знати витрати на обробку одиниці об'єму потоків на даному виробництві ( $Z_{рец}$  і  $Z_{сд}$ ). Тоді

$$\Sigma V_{пер} = Z_{рец} \cdot V_{рец} + Z_{сд} \cdot V_{сд} \quad (4.5)$$

При виконанні курсової роботи приймаються усереднені показники для подібних схем

$$Z_{сд} = n \cdot Z_{рец}, \quad (4.6)$$

де  $n = 5 \div 9$ , значення уточнюються в завданні на виконання курсової роботи.

Якщо врахувати, що об'ємні потоки газових сумішей при нормальних умовах пропорційні сумі мольних потоків компонентів ( $\Sigma F_i$ ), можна записати

$$\begin{aligned} \Sigma V_{пер} &= Z_{рец} \cdot (\Sigma F_{i, рец}) \cdot 22,4 + n \cdot Z_{рец} \cdot (\Sigma F_{i, сд}) \cdot 22,4 \\ \Sigma V_{пер} &= Z_{рец} \cdot 22,4 \cdot (\Sigma F_{i, рец} + n \cdot \Sigma F_{i, сд}) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Умовно постійна складова частина собівартості ( $\Sigma CB_{пост}$ ) і витрати на повернення одиниці об'єму рецикла ( $Z_{рец}$ ) постійні для кожного виробництва, тому співвідношення (4.3) і (4.7) показують, що мінімум умовно перемінних витрат і визначаємої ними собівартості досягається при мінімальній сумі ( $\Sigma F_{i, рец} + n \cdot \Sigma F_{i, сд}$ ) і тому оптимальні по собівартості параметри схеми можна визначити, мінімізуючи суму

$$S = \Sigma F_{i, рец} + n \cdot \Sigma F_{i, сд} \quad (4.8)$$

Програма "Схема" дає можливість розраховувати мольні потоки рециклу і здувки, таким чином, знайдено критерій, який дозволяє вирішити задачу оптимізації параметрів схеми за економічним показником.

Визначити параметри, що оптимізуються, і метод оптимізації можна на підставі виду цільової функції для рішення задачі. Через те, що ми не маємо рівняння, що пов'язує сумарні мольні потоки з параметрами схеми, створити цільову функцію з (4.8) у вигляді рівняння не можна, але її можна аналізувати у

загальному вигляді. Сумарні мольні потоки рециклу і здувки одержують у результаті розрахунку за допомогою програми “Схема”, їхнє значення визначається набором вхідних даних цієї програми –  $P_{вх}$ . Цільову функцію можна створити з (4.8) в неявному вигляді

$$Y = F(P_{вх})$$

де  $P_{вх}$  – початкові параметри програми “Схема”.

Параметри схеми, що оптимізуються, треба вибрати з вектору  $P_{вх}$ . Вони повинні відповідати ряду вимог. По-перше, вони повинні бути змінюваними, тому із шести параметрів, що входять у вхідні дані програми, варто виключити, як постійну величину, продуктивність установки. Параметри, що оптимізуються, мають бути незалежними, а п'ять параметрів, що залишилися, є взаємозалежними. Аналіз способів їх визначення за допомогою прикладних програм показує, що три параметри – концентрації кисню і метанолу на вході в реактор та ступень перетворення на виході з реактору визначають значення інших – концентрації води і селективності у реакторі.

Для зменшення параметричності цільової функції і спрощення рішення задачі доцільно раніше оптимізоване значення ступеню перетворення не змінювати, а прийняти як постійну величину для кожного етапу виконання оптимізаційної задачі.

На цій підставі варто прийняти у якості параметрів схеми, що оптимізуються, концентрації метанолу і кисню на вході в реактор (два параметри), а чотири інших повинні бути постійними при пошуку мінімуму суми  $S$  на кожному етапі оптимізаційної задачі.

Для вирішення таких оптимізаційних задач з метою визначення декількох оптимальних параметрів рекомендується метод крутого сходження [9].

Варто підкреслити, що при рішенні задачі значення прийнятого економічного критерію оптимальності не розраховують, але, проте, знаходять оптимальні значення концентрацій метанолу і кисню на вході в реактор, при яких досягається мінімум собівартості продукції – формаліну, мінімізуючи технічний параметр – суму  $S$ .

## 4.2. МЕТОД КРУТОГО СХОДЖЕННЯ (МЕТОД БОКСА-УІЛСОНА)

Метод крутого сходження запропоновано Дж. Боксом і К. Уілсоном як синтез кращих рис градієнтних методів, причому спробні досліди для з'ясування напрямку руху виконують методом повного факторного експерименту (ПФЕ). Від методу градієнту тут перейняте виконання робочого прямування уздовж вектору-градієнту, визначеного в районі вихідної (базової) точки, а від методу релаксації взято принцип просування не на один робочий шаг (як у методі градієнту), а до досягнення частинного екстремуму функції відгуку на напрямку градієнту без його коригування на кожному робочому кроці. Проведення спробних дослідів методом ПФЕ дозволяє більш точно оцінювати напрямок градієнту, чим при традиційному методі градієнту. Дійсно, для оцінок  $\hat{a}_i$  коефіцієнтів у методі градієнту та у методі крутого сходження при

числі факторів  $n=2$  кількість точок для спробних дослідів в обох методах дорівнює 4, тобто однаково. Але якщо кожну оцінку  $\hat{a}_i$  у методі градієнту одержують за результатами дослідів лише в двох спробних точках (при будь-якому числі  $n$  факторів), то в методі крутого сходження за результатами дослідів у всіх чотирьох спробних точках (у загальному випадку – у всіх  $2^n$  спробних точках).

Проведення спробних дослідів методом ПФЕ дозволяє також одержувати інформацію про взаємодії факторів і достатньо просто здійснювати статистичну перевірку результатів розрахунків.

На першому циклі методу крутого сходження використовується така процедура:

1. Вибирають основну (початкову, нульову) точку  $K_0$ . Звичайно вона відповідає номінальному режиму ведення технологічного процесу. Іноді цю точку вибирають у центрі області, що бажано досліджувати.
2. Вибирають інтервал варіювання  $\Delta x_i$  для кожного фактора  $x_i$ , ( $i=1, 2, \dots, n$ ). Очевидно, що інтервал варіювання  $\Delta x_i$  не повинний бути занадто малим, інакше прямування до екстремуму виявиться уповільненим. З іншого боку, він не повинний бути занадто великим, щоб не вийти за межі досліджуваної області. Вибір інтервалу варіювання  $\Delta x_i$  обумовлюється ціллю конкретного дослідження.
3. Визначають координати спробних точок для нижнього і верхнього рівнів варіювання факторів  $x_i$ , по правилах ПФЕ

$$x_{iB} = x_{i0} + \Delta x_i, \quad x_{iH} = x_{i0} - \Delta x_i$$

і складають ортогональну матрицю планування ПФЕ, для чого фактори нормують по формулі:

$$z_i = (x_i - x_{i0}) / \Delta x_i$$

За результатами ПФЕ обчислюють оцінки коефіцієнтів нормованого рівняння регресії першого порядку

$$\hat{y} = \hat{a}_0 + \hat{a}_1 \cdot z_1 + \hat{a}_2 \cdot z_2 + \dots + \hat{a}_n \cdot z_n \quad (4.9)$$

Для оцінювання ступеня кривизни поверхні відгуку можуть обчислюватися також коефіцієнти при взаємодіях  $z_i z_j$ . Після визначення коефіцієнтів роблять статистичну перевірку значимості  $\hat{a}_i$ , для чого можна розрахувати критичне значення коефіцієнтів із використанням критерію Стьюдента:

$$\hat{a}_{кр} = t_{кр} s \{ \hat{a}_i \}, \quad (4.10)$$

де  $t_{кр} = t_{табл} \{ v_{зн}; q \}$ , що вибирається з відповідних таблиць при числі ступенів свободи  $v_{зн} = N(m-1)$  і прийнятому рівні значимості  $q$ . Орієнтовно значимість коефіцієнтів можна визначити шляхом порівняння їх по абсолютній величині. Якщо деякий коефіцієнт менше 3-5% від максимального, то їм можна зневажити. У курсовій роботі з розрахунковими експериментами перевірка значимості коефіцієнтів виконується спрощеним методом. В нормоване рівняння регресії підставляють вирази для нормування факторів і створюють рівняння регресії з дійсними факторами (дивись п. 4.3.)

4. Обчислюють розрахункові значення робочих шагів у реальному масштабі:

$$\lambda_i = \hat{a}_i \cdot \Delta x_i \quad (4.11)$$

Максимальне по модулю з усіх  $\lambda_i$  ( $i=1, 2, \dots, n$ ) приймають за базове  $\lambda_{\text{баз}}$ .

5. Одержують практичні (округлені) значення робочих шагів  $\lambda_{i, \text{окр}}^0$  для просування уздовж напрямку градієнту, для чого округляють (або змінюють)  $\lambda_{\text{баз}}$  до зручного  $\lambda_{\text{баз.окр}}$  і пропорційно йому змінюють інші  $\lambda_i$  до  $\lambda_{i, \text{окр}}$  по формулі:

$$\lambda_{i, \text{окр}} = (\lambda_{\text{баз.окр}} / \lambda_{\text{баз}}) \cdot \lambda_i \quad (4.12)$$

Округлення роблять до зручного значення або з урахуванням похибок виміру по кожному фактору  $x_i$ . Знаки  $\lambda_{i, \text{окр}}$  повинні відповідати знакам оцінок  $\hat{a}_i$  коефіцієнтів у випадку пошуку максимуму, або протилежними – при пошуку мінімуму. Обчислюють координати  $k$ -х робочих точок ( $k=1, 2, \dots$ ) на напрямку градієнту в реальному масштабі:

$$x_{ik} = x_{i0} + k \cdot \lambda_{i, \text{окр}}; \quad (4.13)$$

у них послідовно виконують уявні і перевіірочні (реальні) досвіди. Розмір  $\lambda_i$  звичайно вибирають так, щоб перша робоча точка ( $k=1$ ) не виходила за межі області ПФЕ.

*Уявні досліди* полягають в одержанні завбачених (розрахункових) значень відгуку  $\hat{y}$  по отриманому лінійному рівнянню регресії. Вони дозволяють:

- 1) скорочувати обсяг реальних дослідів, тобто збільшувати швидкість просування до екстремуму;
- 2) мати уявлення, наскільки добре рівняння регресії апроксимує реальну поверхню відгуку, тобто наскільки розрахункові значення  $u_k$  відрізняються від результатів значень, що спостерігалися,  $u_{k \text{набл}}$  у реальних дослідах;
- 3) оцінювати правильність вибору розміру складових практичного робочого шагу ( $\lambda_{i, \text{окр}}$ ): якщо за число кроків  $k=3$  досягається і перевищується максимально можливе розрахункове значення цільової функції (обумовлене з фізичних властивостей і обмежень, що існують для об'єкта), то  $\lambda_{i, \text{окр}}$  потрібно зменшити; якщо число  $k$  занадто велике, то  $\lambda_{i, \text{окр}}$  варто збільшити або ставити реальні досліди.

*Реальні (перевіірочні) досліди* виконують на початку прямування у базовій точці і уздовж напрямку градієнту через 2–4 уявних досліди. Робоче прямування продовжують, поки не буде досягнутий частинний екстремум на напрямку градієнту чи буде порушене якесь обмеження. У роботі можна не виконувати реальні (перевіірочні) досліди на цьому етапі, тому що кількість виконуваних кроків невелика.

6. Точку частинного екстремуму на початковому напрямку градієнту приймають за нову нульову точку й організують *другий цикл* крутого сходження. Порядок роботи на другому циклі той же, що і на першому. Розходження полягає в тому, що інтервали варіювання при постановці спробних дослідів (ПФЕ) і розмір робочих шагів у зв'язку з наближенням до екстремуму і збільшенням кривини поверхні відгуку звичайно вибирають меншими, чим на першому циклі. У разі потреби виконують *третій цикл* крутого сходження.

7. Пошукове робоче прямування припиняють по досягненню області екстремуму або при порушенні обмежень.

*Достоїнства методу крутого сходження:*

- висока ефективність (завадостійкість) у смислі точності оцінювання складових градієнту: якщо в градієнтних методах кожна складова  $\hat{a}_i$ , оцінюється лише по двох точках факторного простору, то в ПФЕ, котрий у методі крутого сходження використовується для цієї цілі, кожний коефіцієнт оцінюється по всім  $N=2^n$  точкам;
- висока ефективність в смислі швидкості прямування до екстремуму за рахунок винятку спробних дослідів на кожному робочому кроку і за рахунок уявних дослідів;
- спробні досліді, що виконуються методом ПФЕ, дозволяють одержувати інформацію про оцінки  $\hat{a}_{i1}$  коефіцієнтів при взаємодіях факторів  $z_i z_l$ , що характеризують кривину поверхні відгуку: збільшення  $\hat{a}_{i1}$  при зменшенні  $\hat{a}_i$  звичайно характеризує наближення до екстремуму;
- ПФЕ з застосуванням паралельних дослідів дозволяє достатньо просто здійснювати надійну статистичну інтерпретацію результатів;
- метод найбільш ефективний із усіх відомих при положистих поверхнях відгуку.

*Недоліком розглянутого методу є дещо більша, ніж у попередніх методах, складність планування спробних дослідів, що потребує одночасного варіювання відразу всіх факторів щодо базової точки, і менша оперативність у порівнянні із симплексним методом в умовах дрейфуючих об'єктів.*

### 4.3. ПОВНИЙ ФАКТОРНИЙ ЕКСПЕРИМЕНТ

Для побудови лінійних статичних математичних моделей застосовують повний факторний експеримент, що використовує ортогональну матрицю планування. Математичний опис поверхні відгуку об'єкта в окрузі точки базового режиму  $\bar{x}_0^T = (x_{10}; x_{20}; \dots; x_{n0})$  можна одержати варіюванням кожного з факторів  $x_i$  на двох рівнях, що відрізняються від базового рівня  $x_{i0}$  на розмір інтервалу варіювання  $\Delta x_i$ . Інтервал варіювання по кожному керованому фактору вибирають так, щоб збільшення розміру відгуку у до базового значення  $y_0$  при реалізації  $x_{i0} \pm \Delta x_i$  можна було виділити на фоні «шуму» при невеликому числі паралельних дослідів.

*Повним факторним експериментом (ПФЕ) називається експеримент, що реалізує всі можливі комбінації рівнів  $n$  незалежних керованих факторів, кожний із яких варіюють на двох рівнях, причому не один з наборів факторів не повторюються. Число цих комбінацій  $N=2^n$  визначає тип ПФЕ. Для спрощення подальший виклад побудуємо на прикладі планування типу  $N=2^2$ , тобто на прикладі об'єкта з двома ( $n=2$ ) незалежними керованими факторами  $x_1$ ,*

$x_2$ . При плануванні експерименту проводять перетворення розмірних керованих незалежних факторів  $x_i$  у безрозмірні, нормовані:

$$z_i = (x_i - x_{i0}) / \Delta x_i. \quad (4.14)$$

Це дає можливість легко побудувати ортогональну матрицю планування і значно полегшує подальші розрахунки, тому що в цьому випадку верхні і нижні рівні варіювання  $z_{iB}$  і  $z_{iH}$  у відносних одиницях рівні відповідно  $+1$  і  $-1$  незалежно від фізичної природи факторів, значень основних рівнів і інтервалів варіювання факторів  $\Delta x_i$ .

Для двохфакторної задачі теоретичне рівняння регресії щодо нормованих факторів має вигляд

$$M\{y\} = \alpha_0 + \sum_{i=1}^2 \alpha_i z_i + \sum_{\substack{i;l=1 \\ i < l}}^2 \alpha_{il} z_i z_l, \quad (4.15)$$

де  $M\{y\}$  – математичне завбачення відгуку.

Процес знаходження (ідентифікації) моделі методом ПФЕ складається з:

- планування експерименту;
- проведення експерименту на об'єкті дослідження;
- перевірки відтворюваності експерименту;
- одержання математичної моделі об'єкту з перевіркою статистичної значимості вибіркового коефіцієнтів регресії;
- перевірки адекватності математичного опису.

#### 4.3.1. Планування експерименту

Матрицю планування (МП) ПФЕ  $2^2$  можна представити у вигляді такої таблиці (табл. 4.1).

**Таблиця 4.1**

*Матриця планування ПФЕ*

<b>G</b>	<b>z<sub>1</sub></b>	<b>z<sub>2</sub></b>	<b>z<sub>1</sub> z<sub>2</sub></b>
<b>1</b>	-1	-1	+1
<b>2</b>	+1	-1	-1
<b>3</b>	-1	+1	-1
<b>4</b>	+1	+1	+1

Її складають за такими правилами:

1. Кожний  $g$ -й рядок матриці містить набір координат  $z_{ig}$  точки, у якій проводиться  $g$ -й дослід ( $i = 1, 2, \dots, n$ ;  $g = 1, 2, \dots, N$ ).
2. Оскільки змінні  $z_i$  приймають лише значення  $+1$  і  $-1$ , усі взаємодії  $z_i z_l$  можуть приймати тільки такі ж значення.
3. У першому рядку ( $g=1$ ) усі керовані фактори вибирають на нижньому чи верхньому рівні, тобто  $z_i = -1$  чи  $+1$ . Наступні  $g$ -варіанти варіювання при упорядкуванні МП вибирають так: при порядковому переборі усіх варіантів



частота зміни знака факторів для кожного наступного фактора  $z_{i+1}$  удвічі менше, ніж для попереднього  $z_i$ .

#### 4.3.2. Проведення експерименту на об'єкті дослідження

Через те, що зміна відгуку  $y_g$  носить випадковий характер, в кожній точці  $\bar{x}_g$  приходиться проводити  $m$  паралельних дослідів і результати спостережень  $y_{g1}, y_{g2}, \dots, y_{gn}$  усереднювати:

$$\bar{y}_g = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^m y_{gk}. \quad (4.16)$$

Перед реалізацією плану на об'єкті необхідно рандомізувати варіанти варіювання факторів, тобто за допомогою таблиці рівномірно розподілених випадкових чисел визначити послідовність реалізації варіантів варіювання плану в  $Nm$  дослідах. Методика проведення рандомізації докладно описана в [9]. У даній курсовій роботі використовують розрахункові експерименти і паралельні досліди не проводяться.

#### 4.3.3. Одержання математичної моделі об'єкта

Як уже вказувалося вище, користуючись методом ПФЕ, можна одержати незалежні оцінки  $a_0, a_i, a_{il}$  відповідних коефіцієнтів  $\alpha_0, \alpha_i, \alpha_{il}$ , тобто  $a_0 \rightarrow \alpha_0, a_i \rightarrow \alpha_i, a_{il} \rightarrow \alpha_{il}$ . Ці оцінки легко знайти по формулах:

$$a_0 = \frac{1}{N} \sum_{g=1}^N \bar{y}_g; \quad a_i = \frac{1}{N} \sum_{g=1}^N z_{ig} \bar{y}_g \quad (i = 1, 2, \dots, n); \quad (4.20)$$

$$a_{il} = \frac{1}{N} \sum_{g=1}^N z_{ig} z_{lg} \bar{y}_g \quad (i; l = 1, 2, \dots, n; i \neq l). \quad (4.21)$$

Після визначення оцінок  $a$  коефіцієнтів регресії необхідно перевірити гіпотези про їхню значимість. У курсовій роботі цю оцінку виконують спрощеним методом порівнювання. Коефіцієнт, який менше 5% найбільшого коефіцієнта, можна вважати незначимим. В остаточному нормованому рівнянні регресії (4.9) залишають лише значимі коефіцієнти.

У курсовій роботі не виконується статистична перевірка адекватності, так як застосовується розрахунковий експеримент. Оцінюється лише точність розрахунків по рівнянню регресії.

Використовуючи вирази для нормування факторів (4.14), створюють рівняння регресії з дійсними факторами

$$y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_{12} x_1 x_2. \quad (4.22)$$

Для вибору інтервалу варіювання проводять попередні експерименти. Інтервал варіювання можна вибирати рівним 0,05–0,3 від припустимого діапазону варіювання факторів, тобто область варіювання складає приблизно

10–60% від усього діапазону. Початкову точку варіювання (базову точку) вибирають як можна ближче до центру області факторного простору, у якому складається математичний опис об'єкта (або області обмежень).

#### 4.4. ПРИКЛАД ОПТИМІЗАЦІЇ СХЕМИ ЗА ЕКОНОМІЧНИМ КРИТЕРІЄМ

Оптимізаційна задача виконується за вище наведеною методикою шляхом мінімізації суми  $S$ . Далі у прикладі цю суму позначають  $Y$ , як прийнято у методиці методу “крутого сходження”. Під поняттям “реальний експеримент” розуміють розрахунок  $Y$  по параметрам схеми (програма “Схема”), а “уявний експеримент” – розрахунок  $Y$  по рівнянню регресії. У курсовій роботі необхідно пояснити усі етапи роботи - вибір критерію оптимальності, характеристику цільової функції та її аналіз з виділенням двох параметрів схеми, що оптимізуються – концентрацій метанолу і кисню на вході в реактор, вибір методу рішення задачі визначення оптимальних значень концентрацій метанолу і кисню, особливості рішення оптимізаційної задачі в даному випадку.

##### 4.4.1. Пошук оптимальної області

Пошук оптимальної області починають із планування повного факторного експерименту (ПФЕ) у районі вихідної (базової) точки. За результатами ПФЕ встановлюють рівняння регресії, що зв'язує прийнятий критерій оптимальності з параметрами схеми, що варіюються - концентрації метанолу і кисню в газовій суміші на вході в реактор:

$$Y = b_0 + b_1 \cdot X_1 + b_2 \cdot X_2 + b_{12} \cdot X_1 \cdot X_2, \quad (4.23)$$

де  $Y$  – критерій оптимальності – сумарний потік, кмоль/год.;  $X_1$  – концентрація метанолу, моль/м<sup>3</sup>;  $X_2$  – концентрація кисню, моль/м<sup>3</sup>;  $b_0, b_1, b_2, b_{12}$  – коефіцієнти рівняння регресії, що визначаються за результатами ПФЕ.

У табл. 4.2 приведено план повного факторного експерименту при двох факторах, що варіюються на двох рівнях, приведені безрозмірні нормовані значення відповідних факторів  $z_1, z_2$  (у закодованому виді) та  $X_1, X_2$  (у вимірюваному виразі). Фактори нормують по формулі (4.14).

Результати виміру (спостереження) критерію  $Y$  у таких чотирьох точках дозволяють визначити коефіцієнти рівняння регресії з нормованими факторами:

$$Y = a_0 + a_1 Z_1 + a_2 Z_2 + a_{12} Z_1 Z_2. \quad (4.24)$$

Підставивши в це рівняння вираження нормованих факторів по формулі (4.14), одержують рівняння регресії (4.23).

Інтервал варіювання факторів – концентрацій метанолу і кисню на вході в реактор – при виконанні роботи варто приймати невеликими 0,05–0,1 моль/м<sup>3</sup> з тим, щоб можна було не перераховувати параметри реактора – ступінь перетворення і селективність, прийнявши їх у всіх точках ПФЕ рівними з

нульовою (базовою) точкою. У прикладі інтервал варіювання обох факторів прийнят 0,1 моль/м<sup>3</sup>.

У нульовій точці концентрація метанолу – 3,2 моль/м<sup>3</sup>, концентрація кисню – 3,9 моль/м<sup>3</sup>. У цьому випадку (7.2) при  $z_1=+1$   $X_1=3,3$  моль/м<sup>3</sup>, при  $z_1=-1$   $X_1=3,1$  моль/м<sup>3</sup>, при  $z_2=+1$   $X_2=4,0$  моль/м<sup>3</sup>, при  $z_2=-1$   $X_2=3,8$  моль/м<sup>3</sup>.

Для чотирьох точок за планом ПФЕ проводять матеріальний розрахунок схеми, визначають потоки рециклу і здувки та обчислюють значення  $Y$ , прийнявши у формулі (4.8) значення  $n = 7$  (табл.4.2).

Таблиця 4.2

## Результати розрахунків схеми в точках ПФЕ

Номер розрахунку	Фактори		Концентрації, моль/м <sup>3</sup>		Потоки, кмоль/г		Критерій $Y$
	$Z_1$	$Z_2$	Метанол	Кисень	Рецикл	Здувка	
1	+1	+1	3,3	4,0	1806,8	550,8	5662,4
2	-1	+1	3,1	4,0	1965,7	558,7	5876,4
3	+1	-1	3,3	3,8	1830,5	532,7	5559,4
4	-1	-1	3,1	3,8	1989,8	540,5	5773,3

Значення коефіцієнтів рівняння регресії (4.24) із нормованими факторами знаходимо по формулах:

$$a_0=(Y_1+Y_2+Y_3+Y_4)/4=(5662,2 + 5876,4 + 5559,4 + 5773,3)/4 = 5717,9;$$

$$a_1=(Y_1z_{11}+Y_2z_{12}+Y_3z_{13}+Y_4z_{14})/4=(+5662,2 - 5876,4 + 5559,4 - 5773,3)/4 = -107,0;$$

$$a_2=(Y_1z_{21}+Y_2z_{22}+Y_3z_{23}+Y_4z_{24})/4=(+5662,2 + 5876,4 - 5559,4 - 5773,3)/4 = 51,57;$$

$$a_{12}=(Y_1z_{11}z_{21}+Y_2z_{12}z_{22}+Y_3z_{13}z_{23}+Y_4z_{14}z_{24})/4=(+5662,2 - 5876,4 - 5559,4 + 5773,3)/4 = -0,075.$$

Оцінку значимості коефіцієнтів виконують спрощеним методом порівнювання. Останній коефіцієнт ( $a_{12}$ ) менше 5% найбільшого коефіцієнта ( $a_0$ ), тому його можна вважати не значимим ( $a_{12}=0$ ).

Рівняння регресії з нормованими факторами:

$$Y_6 = 5718 - 107,0 \cdot z_1 + 51,57 \cdot z_2.$$

Підставивши в нього вираження нормованих факторів  $z_1=(X_1-3,2)/0,1$  і  $z_2=(X_2-3,9)/0,1$  і провівши нескладні перетворення, одержуємо рівняння регресії (дивися формулу 4.23) у виді:

$$Y_6 = 7131 - 1070 \cdot X_1 + 515,7 \cdot X_2. \quad (4.25)$$

Перевірку вірності рівняння регресії можна здійснити, порівняв значення критерію оптимальності, обчислене по потоках рециклу і здувки в базовому варіанті  $Y_6 = 5713$  із розрахунковим по рівнянню (4.25) при  $X_1=3,2$  і  $X_2=3,9$ :

$$Y_{6,p} = 7131 - 1070 \cdot 3,2 + 515,7 \cdot 3,9 = 5718.$$

Відхилення складає приблизно 0,11%, точність цілком достатня.

Знаючи рівняння регресії, що описує поверхню відгуку в області нульової точки, можна переходити до другого етапу – пошуку оптимальної області. Напрямок прямування по градієнту до оптимальної області визначається

розмірами зміни кожного фактора на кожному кроці. Теорія використовуваного методу оптимізації визначає методику розрахунку змін факторів.

Обчислюють допоміжні розміри розрахункових шагів

$$\lambda_1 = a_1 \cdot \Delta X_1 = -107,0 \cdot 0,1 = -10,7; \quad (4.26)$$

$$\lambda_2 = a_2 \cdot \Delta X_2 = 51,57 \cdot 0,1 = 5,16; \quad (4.27)$$

Розмір  $\lambda_1$  по абсолютному розміру більше  $\lambda_2$ , тому в якості базового приймаємо фактор  $X_1$ . Його при прямуванні по градієнту рекомендується змінювати на 10,7, але така зміна неможлива, тому що його значення в початковій (нульовій) точці прямування складає усього 3,2.

Приймаємо округлене робоче значення зміну базового фактора  $X_1$  ( $\lambda_{1,окр}$ ) рівним 0,1. Знак змінюється на протилежний у зв'язку з тим, що критерій  $Y$  мінімізується. Округлене робоче значення зміни фактора  $X_2$  розраховуємо по формулі:

$$\lambda_{2,окр} = \lambda_{1,окр} \cdot \lambda_2 / \lambda_1 = 0,1 \cdot 5,16 / (-10,7) = -0,0481. \quad (4.28)$$

Округляємо робочий шаг зміни фактора  $X_2$  до  $\lambda_{2,окр} = -0,05$ . Напрямок зміни  $X_2$  протилежний напрямку зміни  $X_1$ .

Складають план прямування по градієнту до оптимальної області (табл.4.3) і на кожному кроці за значеннями факторів  $X_1$  і  $X_2$  по формулі (4.25) розраховують розмір критерію оптимальності  $Y$ . Прямування зупиняють, коли порушиться задане обмеження по співвідношенню концентрацій метанолу і кисню (1 / 1.10).

**Таблиця 4.3**

*Прямування до оптимальної області*

Шаг	Значення факторів		Відношення $C_M / C_K$	Критерій $Y$
	$X_1$	$X_2$		
<b>0</b>	3,2	3,9	1 / 1,21	5718
<b>1</b>	3,3	3,85	1 / 1,16	5585
<b>2</b>	3,4	3,8	1 / 1,12	5346
<b>3</b>	3,5	3,75	1 / 1,07	Обмеження порушено

У прикладі виконано мінімально допустиму кількість шагів ( $k=3$ ). Кількість шагів краще було б збільшити до 5 – 7 шляхом зменшення зміни факторів.

Таким чином, на шагу 2 знайдена точка оптимальної області (00) з урахуванням обмеження значення відношення  $C_M/C_K$ , при цьому критерій  $Y$  вдалося знизити з 5713 до 5346 або на 6,5% у порівнянні з базовою точкою.

#### 4.4.2. Розрахунок реактора і схеми в оптимальній області

Дійсний дослід, тобто розрахунок трубчатого реактора в знайдений точці оптимальної області виконано аналогічно розрахунку у базовій точці (дивися п.3.3). У вихідні дані внесені зміни – концентрації метанолу – 3,4 моль/м<sup>3</sup>,

кисню – 3,8 моль/м<sup>3</sup>. Аналіз результатів розрахунків трьох варіантів з X рівним 0.968, 0.972 та 0.975 дозволив визначити оптимальний ступень перетворення у цьому випадку  $X_{\text{отп}} = 0,968$ . Параметри цього варіанту наведені у табл. 4.4, у курсовій роботі треба наводити результати усіх розрахунків.

Таблиця 4.4

*Оптимальні параметри реактора в точці оптимальної області*

№	$\omega$ , м/с	$T_{\text{хл}}$ , °С	$T_{\text{г.т}}$ , °С	X, частки	SeI, Частки	$\tau_k$ , с	$\Delta P$ , МПа	Вихід, %
1	1,45	229	366	0,968	0,947	1,179	0,030	91,67

З отриманими параметрами реактора для  $X_{\text{отп}} = 0,968$  виконано матеріальний розрахунок схеми. Розрахована концентрація води в потоці на вході з реактору склала 0,602 моль/м<sup>3</sup>, різниця від заданого значення 0,611 моль/м<sup>3</sup> менше припустимого, у повторному розрахунку реактора немає необхідності. Параметри потоків схеми – у табл. 4.5.

Таблиця 4.5

*Параметри потоків схеми*

Потік	кмоль/год
мольний потік метанолу на вході ( $x_{22}$ )	194
сумарний мольний потік суміші на вході в реактор ( $x_{31}$ )	2545
сумарний мольний потік суміші на виході реактора ( $y_{31}$ )	2643
сумарний мольний потік рециклу ( $y_{52}$ )	1752
сумарний мольний потік здувки ( $y_{51}$ )	520,5
у тому числі оксид вуглецю	9,95

Отримані у результаті реального розрахункового експерименту параметри потоків дозволяють розрахувати друге уточнене значення критерію Y для точки оптимальної області

$$Y_{\text{oo}} = 1720 + 7 \cdot 520,5 = 5363,5$$

Очевидно, що вже в цій точці оптимальної області в порівнянні з базовим варіантом вдалося понизити значення критерію Y з 5713 до 5363,5.

Вміст CO у здувці складає 0,0191 мольних часток чи 1,91% об.

Додаткові параметри схеми наведені в табл. 4.10.

#### 4.4.3. Аналіз оптимальної області

Аналіз оптимальної області з метою пошуку оптимальної точки виконується так само, як пошук оптимальної області.

Пошук оптимальної точки починають із планування повного факторного експерименту (ПФЕ) у районі знайденої точки оптимальної області. Інтервал варіювання факторів – концентрацій метанолу і кисню на вході в реактор – варто приймати меншим, чим при пошуку оптимальної області. У прикладі інтервал варіювання обох факторів прийнято 0,05 моль/м<sup>3</sup>.

Для чотирьох точок за планом ПФЕ проводять матеріальний розрахунок схеми, визначають потоки рециклу і здувки й обчислюють значення критерію  $Y$ . Результати приведені в табл.4.6.

Таблиця 4.6

Результати розрахунків схеми в точках ПФЕ при аналізі оптимальної області

Номер розрахунку	Фактори		Концентрації, моль/ м <sup>3</sup>		Потоки, кмоль/год.		Критерій $Y$
	$Z_1$	$Z_2$	Метанол	Кисень	Рецикл	Здувка	
1	+1	+1	3,45	3,85	1716,3	522,75	5375,55
2	-1	+1	3,35	3,85	1784,0	526,55	5469,85
3	+1	-1	3,45	3,75	1723,2	514,85	5326,95
4	-1	-1	3,35	3,75	1791,2	517,65	5414,75

Розраховані значення коефіцієнтів рівняння регресії з нормованими факторами  $a_0=5397$ ;  $a_1=-45,5$ ;  $a_2=25,9$ ;  $a_{12}=-0,137$ . Останній коефіцієнт ( $a_{12}$ ) можна вважати незначимим.

Рівняння регресії з нормованими факторами:

$$Y_{00} = 5397 - 45,5 \cdot z_1 + 25,9 \cdot z_2. \quad (4.29)$$

Підставивши в рівняння вираження нормованих факторів  $z_1=(X_1-3,4)/0,05$  і  $z_2=(X_2-3,8)/0,05$  і провівши нескладні перетворення, одержуємо рівняння регресії у виді:

$$Y_{00} = 6523 - 910 \cdot X_1 + 518 \cdot X_2. \quad (4.30)$$

Перевірку вірності рівняння регресії можна здійснити, порівнявши значення критерію оптимальності 5363,5, обчислене по потоках рециклу і здувки (дивися п.4.4.2) із розрахунковим по рівнянню (4.30) при  $X_1 = 3,4$  і  $X_2 = 3,8$ :

$$Y_{00,p} = 6523 - 910 \cdot 3,4 + 518 \cdot 3,8 = 5396,4.$$

Відхилення (0,7%) незначне, точність цілком достатня.

Рівняння регресії (4.30) дозволяє перейти до другого етапу методу крутого сходження – прямуванню до оптимуму по градієнту. Обчислюють розрахункові шаги змін факторів

$$\lambda_1 = -45,5 \cdot 0,05 = -2,275;$$

$$\lambda_2 = 25,9 \cdot 0,05 = 1,295.$$

У якості базового приймаємо фактор  $X_1$ , його зміну при прямуванні до оптимуму ( $\lambda_{1,окр}$ ) приймаємо рівною 0,05. Знак змінюється на протилежний у зв'язку з тим, що критерій  $Y$  мінімізується. Округлене робоче значення зміни фактора  $X_2$  розраховуємо по формулі:

$$\lambda_{2,окр} = \lambda_{1,окр} \cdot \lambda_2 / \lambda_1 = 0,05 \cdot 1,295 / (-2,275) = -0,00569.$$

Округляємо зміну фактора  $X_2$  до  $-0,006$ . Напрямок зміни  $X_2$  протилежний напрямку зміни  $X_1$ .

Складають план прямування по градієнту до оптимальної точки (табл.4.7) і на кожному кроці за значеннями факторів  $X_1$  і  $X_2$  по формулі (4.30) розраховують розмір критерію оптимальності  $Y$ . Прямування зупиняють, коли

порушиться задане обмеження по співвідношенню концентрацій метанолу і кисню.

Таблиця 4.7

## Прямуювання до оптимальної точки

Шаг	Значення факторів		Відношення $C_m / C_k$	Критерій Y
	$X_1$	$X_2$		
0	3,40	3,8	1 / 1,8	5359,6
1	3,45	3,794	1 / 1,10	5348,4
2	3,50	3,788	1 / 1,08	Обмеження порушено

У прикладі виконано меншу, ніж допустимо кількість шагів ( $k < 3$ ). Кількість шагів треба збільшити шляхом зменшення зміни фактору  $X_1$ , наприклад до 0,02, і фактору  $X_2$  до відповідного значення. У прикладі це не зроблено, помилка залишена навмисно.

В результаті рішення оптимізаційної задачі на цьому етапі з урахуванням обмеження знайдені оптимальна концентрація метанолу на вході в реактор (3,45 моль/м<sup>3</sup>) і оптимальна концентрація кисню на вході в реактор (3,794 моль/м<sup>3</sup>), при цьому критерій оптимальності вдалося ще знизити.

## 4.4.4. Розрахунок реактора і схеми в оптимальній точці

За алгоритмом методу “крутого сходження” в оптимальній точці виконується дійсний розрахунковий експеримент – розрахунок реактору і схеми. Розрахунок трубчастого реактора в оптимальній точці виконано аналогічно (п.3.3. і 4.4.2.) з концентраціями метанолу 3,45 моль/м<sup>3</sup>, кисню – 3,794 моль/м<sup>3</sup>, води – 0,602 моль/м<sup>3</sup>. Аналіз результатів розрахунків трьох варіантів з  $X$  рівним 0,968, 0,972 та 0,975 дозволив визначити оптимальний ступень перетворення у цьому випадку  $X_{отп} = 0,975$ . Параметри оптимального варіанту наведені у табл. 4.8, у курсовій роботі треба наводити результати усіх розрахунків.

Таблиця 4.8

## Оптимальні параметри реактора в оптимальній точці

№	$\omega$ , м/с	$T_{хл}$ , °C	$T_{г.т}$ , °C	$X$ , частки	$SeI$ , частки	$\tau_k$ , с	$\Delta P$ , МПа	Вихід, %
1	1,25	225	364	0,975	0,936	1,680	0,031	91,26

З отриманими параметрами реактора для  $X_{отп} = 0,975$  виконано матеріальний розрахунок схеми (табл. 4.9).

Отримані параметри потоків дозволяють розрахувати уточнене значення критерію Y для оптимальної точки

$$Y_{от} = 1719,9 + 7 \cdot 531,4 = 5439,7$$

Вміст CO у здувці складає 0,02298, чи 2,298 % об.

Додаткові параметри схеми наведені далі в табл. 4.10.

Таблиця 4.9

## Параметри потоків схеми

Потік	кмоль/год
Мольний потік метанолу на вході ( $x_{22}$ )	195
Сумарний мольний потік суміші на вході в реактор ( $x_{31}$ )	2526
Сумарний мольний потік суміші на виході реактора ( $y_{31}$ )	2628
Сумарний мольний потік рециклу ( $y_{52}$ )	1721
Сумарний мольний потік здувки ( $y_{51}$ )	531,0
у тому числі оксид вуглецю	12,2

Таким чином, знайдено остаточне рішення задачі оптимізації схеми за економічним критерієм оптимізації – визначено оптимальні значення концентрацій на вході реактору метанолу  $3,45 \text{ моль/м}^3$ , кисню –  $3,794 \text{ моль/м}^3$  з усіма обмеженнями, в першу чергу, обмеження співвідношення концентрацій. При цих параметрах схеми досягається мінімальне можливе значення критерію суми  $S$  ( $Y$ ) рівне  $5439,7$ , а отже і мінімальне можливе значення економічного критерію оптимальності – частини собівартості продукції ( $\Sigma CV_{\text{пер}}$ ), що залежить від витрат на рецикл та здувку ( $\Sigma B_{\text{пер}}$ ).

Слід підкреслити, що екстремальне значення суми  $S$  визначити не вдалось внаслідок обмеження співвідношення концентрацій метанолу і кисню.

Знайдені параметри схеми покращують економічні показники установки без додаткових капітальних витрат.

#### 4.5. АНАЛІЗ РОБОТИ СХЕМИ ЗА ДОДАТКОВИМИ ПАРАМЕТРАМИ

Виконані вище три розрахунки реактору і схеми (3.3, 4.4.2 і 4.4.4) дозволяють виконати аналіз роботи схеми по додатковим параметрам

Для каталітичних реакторів важливим параметром, що значною мірою впливає на їх вартість, є кількість каталізатору. Об'єм каталізатору в реакторах розраховують за формулою (3.6)

В табл. 4.10 наведені найбільш важливі параметри потоків і елементів схеми, які варто використати для аналізу роботи схеми.

Порівняння наведених в табл.4.10 параметрів дозволяє зробити висновки:

- чутливими до зміни концентрацій на вході реактору метанолу та кисню є об'ємні і мольні потоки схеми;
- при підвищенні концентрації метанолу і зменшенні концентрації кисню в реакційній суміші об'єм каталізатору в реакторі окислення збільшується;
- незначне зменшення виходу формальдегіду у реакторі окислення веде до збільшення витрат метанолу.



Таблиця 4.10

Параметри схеми	Розраховані варіанти		
	Базова точка	Точка оптимальної області	Оптимальна Точка
Вихід продукту в реакторі окислення, %	91,56	91,67	91,26
Мольний потік метанолу ( $X_{22}$ , кмоль/год)	195,0	194,0	196,0
Витрата метанолу, т/ годину	6,24	6,11	6,29
Мольні потоки, кмоль/ годину на вході реактора ( $X_{31}$ ) на виході реактора ( $Y_{31}$ )	2607,0 2773,6	2548,8 2647,6	2523,2 2623,6
Об'ємні потоки, м <sup>3</sup> / годину на вході реактора на виході реактора	58400 62100	57090 62100	56520 58770
Час контакту в реакторі окислення, с	1,18	1,40	1,68
Об'єм каталізатора в реакторі окислення, м <sup>3</sup>	21,6	19,06	26,9
Об'ємні потоки, м <sup>3</sup> / годину Здувки Рециклу	12200 42400	11660 38490	11900 38530
Викід CO без газоочищення, т/рік	2469	2220	2719

## 5. ОПТИМІЗАЦІЯ СХЕМИ ЗА ЕКОЛОГО-ЕКОНОМІЧНИМИ ПОКАЗНИКАМИ

### 5.1. ЗАДАЧА ОПТИМІЗАЦІЇ СХЕМИ ЗА ЕКОЛОГІЧНИМИ ПОКАЗНИКАМИ

Для рішення оптимізаційної задачі в даному випадку використовується еколого-економічний критерій оптимальності – річний економічний ефект очищення газового викиду. Для газоочищення в схемі використовують блок: реактор каталітичного газоочищення + теплообмінник – рекуператор. Блок працює в автотермічному режимі, без додаткових витрат на розігрів газового потоку здувки до необхідної температури на вході в реактор газоочищення .

Економічна ефективність газоочищення розраховується по відверненому річному збитку і додаткових витратах, зв'язаним з експлуатацією блоку. Вихідними даними для розрахунку відверненого збитку навколишньому середовищу є параметри потоку здувки, що очищається перед викидом в атмосферу. Для визначення витрат на впровадження й експлуатацію блоку

газоочищення додатково розраховуються параметри реактора газоочищення по програмі GAZO і оцінюються параметри теплообмінника-рекуператора.

У даному випадку цільова функція також не може бути представлена в явному виді, більш того, на значення критерію оптимальності впливає ще більше число параметрів, тому дана оптимізаційна задача розв'язується шляхом порівняння декількох варіантів за значенням обраного критерію оптимальності. Для порівняння варто використовувати розраховані раніше параметри схеми для базової точки, точки оптимальної області і оптимальної точки.

Для більш детального аналізу у кожній точці розраховують три можливих варіантів режиму роботи реактора газочистки – низькотемпературний ( $T_{\text{вх}} = 250\text{--}300^\circ\text{C}$ ), високотемпературний ( $T_{\text{вих}}=650\text{--}700^\circ\text{C}$ ) і середньотемпературний ( $T_{\text{ср}} = (T_{\text{вх}} + T_{\text{вих}})/2 = 450 - 500^\circ\text{C}$ ).

Результати оптимізації схеми за еколого-економічними показниками можуть не збігтися з результатами оптимізації схеми за економічними показниками.

## 5.2. ОЦІНКА ЕКОЛОГО-ЕКОНОМІЧНОЇ ЕФЕКТИВНОСТІ СИСТЕМ ГАЗОЧИСТКИ

В основу сучасної системи платежів покладена методика визначення економічної ефективності здійснення природоохоронних заходів і оцінки економічного збитку, заподіюваного народному господарству забрудненням навколишнього середовища.

Ефективність проведення заходів щодо охорони навколишнього середовища варто оцінювати з позицій природи, суспільства й окремого підприємства. Екологічний ефект чи ефект для природи полягає в зниженні розмірів забруднення екосистем. Економічний результат вимірюється величиною відверненого річного збитку, що виникає при забрудненні середовища перебування людей. Цей збиток виражається у втраті частини національного доходу внаслідок підвищення захворюваності, зниження працездатності й інших факторів.

Економічний ефект для підприємства визначається по приросту його прибутку за рахунок зниження розмірів платежів природоохоронним органам у результаті проведення заходів щодо захисту середовища.

У курсовій роботі необхідно визначити ефективність систем газоочищення за еколого–економічними показниками.

### 5.2.1. Розрахунок екологічного ефекту

Екологічний ефект в умовних тоннах у рік (ум.т/рік) визначається для газоподібних домішок по формулі:

$$E_{\text{н}} = \Delta M_{\text{C}} \cdot f \cdot \sigma, \quad (5.1)$$

де  $\Delta M_C$  – зміна приведеної маси викидів забруднень із джерела у порівнянні з викидами вихідної суміші без очищення, ум.т/рік;

$f$  – коефіцієнт розсіювання домішок в атмосфері;

$\sigma$  – відносна небезпека забруднення над територією.

Чисельні значення відносної небезпеки  $\sigma$  визначаються в залежності від типу території, що попадає в зону забруднення; їхні значення приведені в табл. 5.1.

Коефіцієнт розсіювання домішок в атмосфері  $f$  являє собою поправку, що враховує характер розподілу часток, що викидаються з джерела. Значення  $f$  варіюються в залежності від швидкості осідання часток. Для газоподібних домішок зі швидкістю осідання менш 1 см/с:

$$f = \frac{4}{1+U} \cdot \frac{100}{1000 + \varphi \cdot H}, \quad (5.2)$$

де  $U$  – значення модуля швидкості вітру на рівні флюгера, м/с. Для Одеси можна прийняти  $U = (5 - 7)$  м/с;  $H$  – висота джерела забруднення, приймається рівна 30 м;  $\varphi = 1 + \Delta T/75$  – виправлення на тепловий підйом факелу викидів;

$\Delta T = (T_c - T_n)$  – середньорічна різниця температур на виході з джерела (сопла труби –  $T_c$ ) і в навколишньому повітрі ( $T_n$ ). Температуру  $T_c$  варто приймати рівній температурі на виході з трубного простору рекуператора  $T_k$ . Для умов Одеси можна прийняти  $T_n = (10 \div 13)^\circ\text{C}$ .

**Таблиця 5.1**

*Відносна небезпека забруднення  $\sigma$*

Тип території	Значення $\sigma$
Курорти, санаторії, заповідники, заказники	8
Території промислових підприємств	4
Житлові райони з висотною забудовою (9 і більш поверхів)	6
Те ж з 5-поверховою забудовою	3
Те ж з 2-поверховою забудовою	1,5
Щільна одноповерхова забудова (селища, пригород)	1
Сільська територія	0,8

Приведена маса річного викиду забруднень в атмосферу в умовних тоннах визначається як:

$$M_C = \sum_{S=1}^N A_S \cdot m_S, \quad (5.3)$$

де  $A_S$  – показник відносної агресивності  $S$ -ої речовини, ум.т/т;

$N$  – кількість токсичних речовин;

$m_S$  – маса річного викиду  $S$ -ої речовини в атмосферу, т/рік.

Маса річного викиду розраховується по формулі:

$$m_S = Q \cdot C \cdot V \cdot X \cdot \rho / 1000, \quad (5.4)$$

де  $Q$  – об'ємна витрата, м<sup>3</sup>/година;

$C$  – концентрація  $S$ -ої речовини, частки;

$V$  – число годин роботи установки в році;

$X$  – ступінь очищення, частки;

$\rho$  – густина S-ої речовини, кг/м<sup>3</sup>.

Значення показника  $A_s$  для оксиду вуглецю, що міститься в здувці, складає 1 ум.т/т (табл.5.2).

### 5.2.2. Розрахунок витрат на впровадження й економічної ефективності очисних споруд

Економічний результат заходів щодо захисту атмосферного повітря в гривнях визначається по наступній формулі:

$$\Delta P = \Delta Y + \Delta D, \quad (5.5)$$

де  $\Delta Y$  – відвернений збиток, що наноситься суспільству при забрудненні навколишнього середовища, гривень у рік;  $\Delta D$  – додатковий доход від приведених середозахистних заходів. Для розглянутих випадків ця величина може бути прийнята в межах 30 – 70 тис. грн. у рік.

Відвернений збиток визначається по формулі:

$$\Delta Y = \gamma \cdot \Xi_n, \quad (5.6)$$

де  $\gamma$  – вартісна оцінка шкоди від умовної одиниці викидів, грн/ум.т. В Україні відповідно до експертних оцінок  $\gamma = 24$  грн./ум.т.

**Таблиця 5.2**

#### Характеристики забруднюючої речовини

Речовина	Клас небезпеки	$A_s$ , ум.т/т	$\Delta p_s$ ,* грн./т·рік
СО	4	1	46

\* – орієнтовані значення за умови наднормативних викидів.

Річний економічний ефект у гривнях складає:

$$E_{ек} = \Delta П + \Delta P - (\Delta C + E_n \cdot \Delta K), \quad (5.7)$$

де  $\Delta П$  – зміна величини плати за забруднення середовища при установці систем газоочистки в порівнянні з викидами даної суміші в атмосферу без очищення;

$\Delta C$  – приріст експлуатаційних витрат при роботі установки;

$\Delta K$  – приріст одноразових витрат на проектування, придбання й монтаж установок газоочистки;

$E_n$  – нормативний коефіцієнт економічної ефективності одноразових витрат. В Україні для середозахистних заходів його можна прийняти рівним 0,18.

Величина  $\Delta П$  розраховується по формулі:

$$\Delta П = \sum_{S=1}^N \Delta p_s \cdot m_s, \quad (5.8)$$

де  $\Delta p_s$  – зміна величини плати за забруднення середовища, віднесена до 1 тонни S-ої речовини, при установці систем газоочистки в порівнянні з викидами даної суміші в атмосферу без очищення; грн/т·рік. Значення  $\Delta p_s$  вибирається по табл. 5.2.

Розрахувавши  $E_{ек}$ , для розглянутих режимів роботи схеми вибирають той варіант, який забезпечує максимальний річний економічний ефект.

Серед витрат на впровадження очисних споруджень виділяють капітальні й експлуатаційні. Капітальні витрати включають вартість основних виробничих фондів (ОВФ) – апаратів, необхідних для здійснення очищення. У курсовій роботі це витрати на устаткування системи газоочистки – реактора газоочистки і теплообмінника-рекуператора. Методика розрахунку докладно розглянута в прикладі.

Експлуатаційні витрати включають витрати на використання ОВФ. Витрати, співвіднесені на розрахунковий рік, складаються з виробничих експлуатаційних витрат у повному обсязі. У курсовій роботі по цій статті враховується вартість витрачених ресурсів тільки на каталізатор.

Для віднесення капітальних витрат на розрахунковий період використовують амортизацію ОВФ. Амортизація – віднесення частини вартості ОВФ на розрахунковий період. Розмір амортизованих витрат визначається нормою амортизації.

При розрахунку витрат на схеми очищення варто використовувати наступні допущення:

1. Схеми очищення працюють 8000 годин у рік.

2. Схеми установок спрощені і включає тільки такі апарати – реактор і теплообмінник-рекуператор.

Приріст капітальних витрат ( $\Delta C$ ) включає витрати на зазначені апарати і відрізняється для кожного режиму роботи схеми очищення. Розраховують капітальні витрати на підставі усереднених питомих витрат на ОВФ (табл.5.3)

Приріст експлуатаційних витрат на газоочищення, віднесених до розрахункового року визначаються по формулі:

$$\Delta C = \sum C_i \cdot N_i, \quad (5.9)$$

де  $C_i$ ,  $N_i$  – відповідно ціна і річна кількість  $i$ -ої статті експлуатаційних витрат для кожного варіанта.

Докладний розрахунок приросту експлуатаційних витрат приведений у прикладі.

Ціни на складові експлуатаційних витрат, що враховуються, приведені в табл. 5.4.

**Таблиця 5.3**

*Питомі витрати на ОВФ*

Устаткування	Одиниці виміру	Величина
Кожухотрубчастий теплообмінник	грн./м <sup>2</sup>	950
Реактор вертикальний	грн./м <sup>3</sup>	37000

**Таблиця 5.4**

*Ціни на складові експлуатаційних витрат*

Стаття	Одиниці виміру	Ціна за одиницю, грн.
Каталізатор ІКТ*	м <sup>3</sup>	70000

\* – Ціна на каталізатор установлена з урахуванням терміну його роботи 4 роки.

Як видно, для виконання розрахунку потрібні додаткові дані – кількість каталізатора, що завантажується в реактор газоочищення, об'єм реактору газоочищення й орієнтована поверхня теплообмінника. Далі, у прикладі показано, як ці параметри розраховуються

### 5.3. ПРИКЛАД ОПТИМІЗАЦІЇ СХЕМИ ЗА ЕКОЛОГО-ЕКОНОМІЧНИМ КРИТЕРІЄМ

Для рішення задачі використовується спосіб багатоваріантних розрахунків – кілька варіантів схеми порівнюють по величині річного економічного ефекту і таким шляхом знаходять умови досягнення найбільшого значення критерію оптимальності. У курсовій роботі необхідно більш докладно пояснити підготовчий етап рішення оптимізаційної задачі.

#### 5.3.1. Розрахунок параметрів блоку каталітичного газоочищення

Розрахунок елементів блоку газоочищення в оптимальній області та в оптимальній точці виконано аналогічно базовій точці (пп.3.4 та 3.5).

Результати розрахунків устаткування системи газоочищення для усіх режимів приведені в табл. 5.5.

#### 5.3.2. Розрахунок екологічного ефекту

Розрахунок екологічного ефекту виконаний по вище приведених формулах і рекомендованих значеннях констант.

Коефіцієнт розсіювання домішок в атмосфері (5.2.) прийнятий рівним:

$$f = \frac{4}{1+6} * \frac{100}{1000 + \varphi * 30} = 0,0511, \quad (5.10)$$

$$\text{де } \varphi = 1 + \frac{\Delta T}{75} = 1 + \frac{T_{\text{кін, ср}} - 10}{75}.$$

Відносна небезпека забруднень прийнята рівною 4. Значення показників для оксиду вуглецю приведені вище. Зміна маси викидів прийнята за умовою практично повної очистки здувки від СО. Результати розрахунків приведені в табл. 5.6.

Таблиця 5.5

## Результати розрахунків устаткування системи газоочистки

Параметри устаткування	Варіанти роботи схеми								
	В базовій точці (Б)			В точці оптимальної області (ОО)			В оптимальній точці (ОТ)		
Об'ємний потік здувки, м <sup>3</sup> /с	3,39			3,24			3,30		
Зміст СО в здувці, % об	2,034			1,913			2,296		
<b>Реактор газоочистки</b>									
Режим роботи	НТ	СТ	ВТ	НТ	СТ	ВТ	НТ	СТ	ВТ
Температура на вході, °С	300	410	510	300	420	520	300	492	396
Температура на виході, °С	484,2	594,2	694,2	474,8	594,8	694,8	508	699,9	603,9
Ступінь очистки (X)	0,9950	0,9950	0,9951	0,9953	0,9950	0,9951	0,9949	0,9950	0,9951
Час контакту, с	1,43	0,643	0,374	1,470	0,615	0,360	1,345	0,396	0,673
Об'єм каталізатору, м <sup>3</sup>	4,856	2,183	1,270	4,763	1,993	1,166	4,44	1,31	2,22
Вартість каталізатору, грн.	339895	152834	88896	333425	139494	81655	310800	84700	155400
Вартість реактора газоочистки, грн.	256656	115405	67125	251770	105332	61658	23470	6396	11735
<b>Теплообмінник</b>									
Температура t <sub>кін</sub> , °С	195,8	192,5	189,5	186,4	182,8	179,8	219,6	216,5	213,8
Температура t <sub>ср, гор</sub> , °С	340,0	393,4	441,9	330,6	388,8	437,3	363,8	412,2	455,9
Температура t <sub>ср, хол</sub> , °С	160,0	215	265	160,0	220,0	270,0	160,0	210,0	255,0
Середня різниця, °С	180,0	178,4	176,8	170,6	168,8	167,3	203,8	202,2	200,8
Теплове навантаження, кВт	1226,4	1708,3	2146,3	1170,4	1672,0	2090,0	1194,3	1620,8	2004,7
Поверхня, м <sup>2</sup>	681,4	957,8	1213,6	686,0	990,5	1249,2	586,0	801,6	998,1
Вартість, грн.	647290	909923	1152934	651740	940986	1186778	556700	761500	948185
<b>Вартість основних фондів (ДК, грн)</b>	903939	1025326	1120058	903510	1046318	1248436	792634	876146	1018092
<b>Приріст експлуатаційних затрат на газоочистку (ДС, грн./рік)</b>	339895	152834	88896	333425	139494	81655	310800	84700	155400
<b>Річний економічний ефект газоочищення (Е<sub>ек</sub>, грн./рік)</b>	-316529	-151252	-122397	321801	-153616	-132095	256657	-111039	-77372

Таблиця 5.6

## Результати розрахунків екологічного ефекту

Екологічні показники схеми	Варіанти експлуатації схеми		
	В базовій точці	В точці оптимальної області	В оптимальній точці
Об'єм викиду, м <sup>3</sup> /ч	12224	11665	11903
Концентрація CO, % об.	2,034	1,913	2,296
Маса річного викиду CO, (m <sub>S</sub> ) т/рік	2473,9	2240,1	2719,3
Ступінь очистки	0,995	0,995	0,995
Зміна приведеної маси викидів (ΔM <sub>C</sub> ), ум. т/рік	2473,9	2240,1	2719,3
Екологічний ефект (Э <sub>н</sub> ), ум. т/рік	504,7	453,6	555,7
Відвернений збиток (ΔY), грн./рік	12311	11188	13415
Економічний результат заходів по захисту атмосферного повітря (ΔД = 60000 грн.), грн./рік	72311	71188	73415
Зміна величини плати за забруднення середовища (ΔП, грн/рік)	113801	103044	125086

## 5.3.3. Економічна ефективність системи газоочистки

Річний економічний ефект визначають по формулам з розділу 5.2.2. Амортизаційні відрахування, приріст експлуатаційних витрат на газоочистку відрізняється для кожного варіанта роботи реактора газоочистки. Результати розрахунків приведені в табл. 5.5.

Розрахунки показують, що усі варіанти виявляються збитковими.

Приклад наочно показує, як визначаються оптимальні параметри технічної системи й ілюструє значимість задач оптимізації при розробці технологічної схеми з блоком газоочищення.

Еколого-економічна ефективність системи газоочищення підвищується при зменшенні обсягу здувки (порівняння різних варіантів роботи схеми при однаковому режимі роботи реактора ГО) і при підвищенні температури в реакторі ГО (порівняння різних варіантів роботи реактора ГО для будь-якого варіанта роботи схеми).

Якщо об'єднати результати оптимізації параметрів схеми за економічними і екологічними показниками виявляється, що оптимальними виявляються наступні параметри схеми:

– мінімальний об'єм здувки;



– максимально можлива температура в реакторі газоочищення.

Приведена оцінка оптимізованих варіантів схеми ілюструє можливість і доцільність рішення задач по оптимізації хіміко-технологічних схем. Навіть при частинній параметричній оптимізації схеми тільки по двох параметрах (у даному випадку концентраціям метанолу і кисню в суміші на вході реактора) вдасться зменшити експлуатаційні витрати і, отже, економічні показники установки, у першу чергу – собівартість продукції. Знайдені параметри блоку газоочищення, що визначають найбільшу еколого-економічну ефективність системи очистки газів. При рішенні таких задач виконується великий обсяг розрахунків апаратів і схеми по їхніх математичних моделях, тому необхідно і виправдано застосування автоматизованих методів розрахунків.

## СПИСОК РЕКОМЕНДОВАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. 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.
2. Л.Р. Ладієва. Оптимізація технологічних процесів.: Навчальний посібник. – К.: НМЦ ВО, 2003. – 209 с.
3. Жалдак М.І. Основи теорії і методів оптимізації: Навчальний посібник/ Жалдак М.І., Триус Ю.В. Черкаси: Брама –Україна, 2005. – 608 с.
4. 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.
5. Лебедев Н. Н. Химия и технология основного органического и нефтехимического синтеза. – М.: Химия, 1981.
6. Огородников С. К. Формальдегид. – Л.: Химия, 1985.
7. Боресков Г. К., Матрос Ю. Ш. и др. Химическая промышленность, 1977, № 1, с.48-49.
8. Матрос Ю. Ш., Луговской В. И. и др. там же, 1982, №11, с.674-677.
9. Матрос Ю. Ш. Нестационарные процессы в каталитических реакторах. – Новосибирск : Наука, 1982.
10. Алхазов Т. Г., Марголис Л. Я. Глубокое каталитическое окисление органических соединений. – М.: Химия, 1985.
11. Методы и средства автоматизированного расчета химико-технологических систем / Н. В. Кузичкин, С. Н. Саутин и др. – Л.: Химия, 1987.
12. Химико-технологические системы. Синтез, оптимизация и управление / Под ред. И. П. Мухленова. – Л.: Химия, 1986.
13. Ахназарова С. Л., Кафаров В. В. Методы оптимизации в химической технологии / Учеб.пособие для хим.-технол. спец. вузов. – М.: Высш.шк., 1985.