

На правах рукописи

Советин Филипп Сергеевич

Разработка и применение методического обеспечения блочного компьютерного моделирования энергоресурсоёмких химико-технологических систем с применением инструментальных комплексов программ

Специальность:

05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ
(технические науки)

05.17.08 — Процессы и аппараты химических технологий (технические науки)

**Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата технических наук**

Москва 2011

Работа выполнена на кафедре информатики и компьютерного проектирования
Международного института логистики ресурсосбережения и технологической
инноватики РХТУ им. Д. И. Менделеева в г. Москве

Научный руководитель:

доктор технических наук, профессор Гартман Томаш Николаевич

Научный консультант:

Член-корреспондент РАН,
доктор технических наук, профессор
Мешалкин Валерий Павлович

Официальные оппоненты:

Доктор физико-математических наук, профессор

Бутусов Олег Борисович,

заведующий кафедрой прикладной математики и информатики Московского
государственного университета инженерной экологии

Доктор технических наук, профессор

Клинов Александр Вячеславович,

заведующий кафедрой процессов и аппаратов химической технологии Казанского
национального исследовательского технологического университета

Ведущая организация:

Московский государственный университет тонких химических технологий им.
М. В. Ломоносова

Защита состоится «27» декабря 2011 г в 11 часов на заседании диссертационного
совета Д 212.204.10 при РХТУ им. Д. И. Менделеева по адресу 125047, Москва,
Миусская пл., д. 9, Конференц-зал (ауд. 443).

С диссертацией можно ознакомиться в информационно-библиотечном центре РХТУ
им. Д. И. Менделеева

Автореферат разослан « ____ » _____ 2011 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 212.204.10, д. э. н., профессор

З. В. Вдовенко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Обеспечение высоких показателей энергоресурсосбережения на химических, нефтехимических и нефтеперерабатывающих производствах имеет важнейшее значение для повышения эффективности экономики России. Крупнотоннажные производства нефтегазохимического комплекса (НГХК), использующие в качестве сырья и топливно-энергетических ресурсов (ТЭР) большие объёмы нефти и природного газа, представляют собой сложные непрерывные энергоресурсоёмкие химико-технологические системы (ХТС). Для оптимизации показателей энергоресурсосбережения в этих ХТС требуется применение специального методического обеспечения компьютерного моделирования, как отдельных химико-технологических процессов (ХТП), так и ХТС в целом. Наиболее быстрое и эффективное решение указанных задач компьютерного моделирования сложных ХТС может быть получено при выполнении следующих условий: корректная инженерно-технологическая постановка исходной задачи анализа ХТС; разработка специальных методик, процедур и алгоритмов компьютерного моделирования ХТС с большим числом ХТП, единиц оборудования (более 50) и рециклов, для компьютерного анализа различных вариантов технологического и конструкционного оформления ХТП и ХТС.

С середины 1990-х годов для решения указанных задач компьютерного моделирования сложных ХТС широко используются известные инструментальные комплексы проблемно-ориентированных программ “Aspen”, “Hysys”, “PRO-II” и “СHEMCAD”, которые позволяют быстро и надёжно создавать блочные компьютерные модели отдельных ХТП и сложных ХТС в целом для решения задач анализа и оптимизации действующих производств, а также задач синтеза энергоресурсосберегающих ХТС новых проектируемых производств.

Методическое обеспечение компьютерного моделирования сложных ХТС – это совокупность методик, методов и процедур, средств и инструментов разработки компьютерных моделей, совокупность методик разработки, выбора и применения пользователями нормативно-технической документации и комплексов проблемно-ориентированных программ для получения конкретных результатов компьютерного анализа и оптимизации исследуемых ХТС.

Задача разработки методического обеспечения блочного компьютерного моделирования сложных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС с применением комплексов программ относится к классу наиболее трудоёмких эвристическо-вычислительных задач, так как при решении этих задач необходимо, прежде всего, осуществлять приобретение и переработку знаний о функционировании каждого ХТП и ХТС в целом. Применение разработанного методического обеспечения блочного компьютерного моделирования сложных ХТС позволит не только сократить сроки решения трудоёмких задач интенсификации действующих ХТС и разработки проектов ХТС производств высококачественных химических продуктов, но и повысить показатели энергоресурсоэффективности действующих и проектируемых ХТС.

Авторами основополагающих трудов по математическому моделированию ХТС являются отечественные учёные – академик В. В. Кафаров, член-корр. РАН, проф., д. т. н. В. П. Мешалкин, проф., д. т. н. А. А. Большаков, проф., д. т. н. А. И. Бояринов, проф., д. т. н. Т. Н. Гартман, проф., д. т. н. С. И. Дворецкий, проф., д. т. н. Н. Н. Зиятдинов, проф., д. т. н. А. В. Тимошенко, проф., д. т. н. В. А. Холоднов, а

также зарубежные учёные – Н. Вестерберг, А. Гамилец, И. Гросманн, К. Кроу, Г. Стефанопулос, Д. Риппин, Р. Сарджент, Р. Смит, Ф. Фридлер и Д. Химмельблау.

Большой интерес представляют выполненные в последние годы научные работы член-корр. РАН, проф., д. т. н. В. П. Мешалкина, проф. д. ф.-м. н. О. Б. Бутусова, проф., д. т. н., М. И. Дли в области компьютерного моделирования гидродинамики нестационарных потоков, компьютерного анализа текстуры композиционных материалов с использованием фрактально-вейвлетных и нейросетевых методов, а также компьютерного моделирования и анализа экономических систем с использованием нейронных сетей и нечётких множеств.

Профессорами А. И. Бояриновым, В. Н. Ветохиным, Л. С. Гордеевым, Ю. А. Комисаровым и В. Н. Писаренко разработаны оригинальные математические модели процессов ректификации многокомпонентных смесей, химических и биохимических процессов. Однако, к сожалению, указанные учёные не рассматривали вопрос применения универсальных комплексов проблемно-ориентированных программ для решения задач компьютерного моделирования ХТП и ХТС.

Важными функциональными подсистемами сложных непрерывных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС являются системы многофазных химических реакторов и системы ректификации многокомпонентных смесей, для компьютерного моделирования которых требуются разнообразные специальные вычислительные процедуры, при использовании которых возникают проблемы сходимости расчётов многомерных систем уравнений математических моделей, ХТП и ХТС. Для решения задач компьютерного моделирования сложных ХТС и их функциональных подсистем наиболее целесообразно использовать блочные компьютерные модели ХТП и ХТС, входящие в структуру инструментальных комплексов проблемно-ориентированных программ.

Однако научно-обоснованное методическое обеспечение для построения блочных компьютерных моделей и компьютерного анализа сложных ХТП и ХТС в настоящее время не разработано. Также отсутствуют методики и процедуры блочного компьютерного моделирования сложных ХТП с использованием комбинаций стандартных расчётных модулей, входящих в базу данных (БД) комплексов программ.

В настоящее время для повышения энергоресурсоэффективности предприятий НГХК важное значение имеет решение задач анализа энергоресурсоэффективности сложных ХТС производства синтетического жидкого топлива (СЖТ) и ХТС производства метанола из природного газа, которые являются сложными непрерывными крупнотоннажными энергоресурсоёмкими ХТС с большим числом единиц оборудования и рециклов, поэтому снижение и оптимизация показателей удельной энергоресурсоёмкости этих ХТС может обеспечить повышение экономической эффективности данных предприятий.

В связи с этим задача разработки и применения методического обеспечения построения блочных компьютерных моделей ХТП и сложных ХТС для компьютерного анализа показателей энергоресурсосбережения ХТС является актуальной научной задачей, решение которой имеет важное значение для повышения экономической эффективности действующих и проектирования целых новых производств НГХК.

Основные разделы диссертационной работы соответствуют Плану фундаментальных научных исследований РАН на 2008–2012 годы, в том числе пунктам «4. Математическое моделирование в науке и технике» и «38. Научные

основы экологически безопасных и ресурсосберегающих химико-технологических процессов», а также Перечню критических технологий – «Компьютерное моделирование» и «Искусственный интеллект» – и Перечню приоритетных направлений – «Информационно-телекоммуникационные системы» и «Энергосберегающие технологии», определенных «Основами политики РФ в области развития науки и технологии на период до 2010 г. и на дальнейшую перспективу».

Цель работы – разработка специального методического обеспечения блочного компьютерного моделирования крупнотоннажных энергоресурсоёмких сложных ХТС производств нефтегазохимического комплекса с применением инструментального комплекса проблемно-ориентированных программ «СНЕМСАД».

Практически применить разработанное методическое обеспечение блочного компьютерного моделирования сложных ХТС и комплекс программ «СНЕМСАД» для решения задач анализа энергоресурсоэффективности ХТС производств СЖТ и метанола из природного газа.

Для достижения сформулированной цели поставлены и решены следующие взаимосвязанные научные задачи:

I. Разработка научно-обоснованной эвристическо-вычислительной процедуры построения блочных компьютерных моделей сложных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС с использованием комплексов проблемно-ориентированных программ;

II. Создание алгоритма ускорения сходимости расчётов многомерных нелинейных систем алгебраических и трансцендентных уравнений математических моделей ХТП и ХТС в целом;

III. Разработка специальных логико-вычислительных процедур (ЛВП) блочного компьютерного моделирования химических реакторов, ректификационных колонн и систем ректификации многокомпонентных смесей;

VI. Разработка эвристическо-вычислительной процедуры (ЭВП) синтеза сложных интегрированных энергоресурсосберегающих ХТС совместного производства нескольких продуктов;

V. Практическое применение созданного методического обеспечения блочного компьютерного моделирования сложных ХТС с использованием комплекса программ «СНЕМСАД» для решения нескольких задач химической технологии:

- Компьютерного моделирования технологических аппаратов сложных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС производства СЖТ и ХТС производства метанола из природного газа;
- компьютерного анализа сложных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС производства СЖТ и ХТС производства метанола;
- компьютерного анализа синтезированной интегрированной ХТС совместного производства СЖТ и метанола.

Методы исследования. Методы математического моделирования ХТП и ХТС, методы системного анализа, а также вычислительный эксперимент с применением комплекса проблемно-ориентированных программ «СНЕМСАД».

Основные положения, выносимые на защиту.

1. Научно-обоснованная эвристическо-вычислительная процедура построения блочных компьютерных моделей, как отдельных ХТП, так и сложных

- крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС с использованием комплексов проблемно-ориентированных программ;
2. Алгоритм ускорения сходимости расчётов многомерных нелинейных систем алгебраических и трансцендентных уравнений математических моделей ХТП и ХТС в целом;
 3. ЛВП построения блочных компьютерных моделей химических реакторов, ректификационных колонн и систем ректификации многокомпонентных смесей с взаимосвязанными внутренними тепловыми потоками в одном аппарате, которые используются для блочного компьютерного моделирования сложных ХТС;
 4. Алгоритм блочного компьютерного моделирования каталитических химических реакторов с использованием температурных зависимостей констант равновесия при различных степенях приближения к равновесию, величины которых определяются аппроксимацией их значений в гомологических рядах компонентов (в частности углеводородов);
 5. ЭВП синтеза энергоресурсосберегающих интегрированных сложных ХТС производств нескольких химических продуктов на основе самостоятельно функционирующих индивидуальных ХТС;
 6. Компьютерный анализ энергоресурсоэффективности крупнотоннажных индивидуальных ХТС:
 - производства СЖТ из природного газа (5 отделений, 214 аппаратов, 361 поток, в том числе 6 внешних рециклов);
 - производства метанола из природного газа (4 отделения, 132 аппарата, 234 потока, в том числе 6 внешних рециклов).
 7. Компьютерный анализ энергоресурсоэффективности синтезированной интегрированной сложной ХТС совместного производства СЖТ и метанола (7 отделений, 255 аппаратов, 441 поток, в том числе 12 внешних рециклов) с научно-обоснованным выбором вариантов инженерно-технологического оформления отдельных ХТП, определением параметров основных технологических аппаратов и структуры рециклов в интегрированной ХТС.

Обоснованность научных результатов диссертационной работы базируется на использовании известных научных положений, методов системного анализа и математического моделирования, на корректном применении методов математического моделирования ХТП и ХТС и методов вычислительной математики.

Достоверность полученных результатов подтверждается проверкой адекватности разработанных блочных компьютерных моделей ХТП и ХТС, практической применимостью созданного методического обеспечения, включающего процедуры и алгоритмы для решения разнообразных задач компьютерного моделирования сложных ХТС, а также соответствием полученных результатов вычислительных экспериментов экспериментальным данным.

Новые научные результаты, лично полученные автором:

1. Разработана научно-обоснованная ЭВП построения блочных компьютерных моделей, как отдельных ХТП, так и сложных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС с большим числом единиц оборудования и рециклов, отличающаяся возможностью гибко использовать комбинации стандартных расчётных модулей (блоков) комплекса программ «СНЕМСАД» и обеспечивать требуемую точность вычислений, что позволяет с высокой достоверностью практически решать задачи анализа и оптимизации сложных ХТС;

2. Предложен алгоритм обеспечения быстрой сходимости расчётов многомерных нелинейных систем алгебраических и трансцендентных уравнений математических моделей ХТП и сложных ХТС, отличающийся применением комбинаций блочных компьютерных моделей ХТП и ХТС с возможностью научно-обоснованного выбора при расчётах значений начальных приближений и демпфирующих факторов, что обеспечивает быструю сходимость и практически необходимую точность расчётов при вычислительных экспериментах;
3. Разработаны оригинальные ЛВП построения блочных компьютерных моделей химических реакторов и ректификационных колонн с взаимосвязанными внутренними тепловыми потоками в одном аппарате с использованием стандартных расчётных модулей комплекса программ «СHEMСAD», что позволило осуществить компьютерное моделирование различных типов технологических аппаратов: химических реакторов с рубашкой, автотермических химических реакторов и печей, а также простых и сложных ректификационных колонн, систем химических реакторов и колонн ректификации;
4. Предложена методика компьютерного моделирования химических реакторов на основе перехода от сложных математических моделей реакторов с использованием констант равновесия к упрощённым математическим моделям, требующим задания только степеней превращения базовых реагентов и ограниченного набора технологических данных, что обеспечивает более быструю устойчивую сходимость расчётов при вычислительных экспериментах;
5. Предложен оригинальный алгоритм блочного компьютерного моделирования химических реакторов, отличающийся использованием температурных зависимостей констант равновесия при различных степенях приближения к равновесию, величины которых определяются аппроксимацией их значений в гомологических рядах компонентов (в частности углеводородов);
6. Предложена ЭВП синтеза энергоресурсосберегающих интегрированных сложных ХТС производств нескольких химических продуктов на основе комбинирования структуры и некоторых аппаратов самостоятельно функционирующих индивидуальных ХТС, отличающаяся возможностью использования общих технологических потоков и однотипных отдельных ХТП исходных индивидуальных ХТС;
7. Разработана (синтезирована) на основе комбинирования технологических схем индивидуальных ХТС производств СЖТ и метанола новая интегрированная ХТС совместного производства СЖТ и метанола из природного газа, для которой определены научно-обоснованные варианты инженерно-аппаратурного оформления отдельных ХТП, значения параметров основных технологических аппаратов и новая структура рециклов в интегрированной ХТС, что позволило снизить показатели удельной энергоресурсоёмкости интегрированной ХТС по сравнению с индивидуальными ХТС.

Научная значимость работы.

Разработанные в диссертации методическое обеспечение блочного компьютерного моделирования сложных ХТС включающее, совокупность процедур и алгоритмов, вносят определённый вклад в развитие методов математического моделирования сложных ХТС и может быть применено для построения компьютерных моделей сложных энергоресурсоёмких ХТС производств НГХК.

Практическая значимость:

Полученные с применением предложенных автором методик, процедур и алгоритмов блочного компьютерного моделирования результаты синтеза и

компьютерного анализа интегрированной ХТС совместного производства СЖТ и метанола из природного газа позволили разработать ряд научно-обоснованных рекомендаций по изменению значений технологических параметров отдельных однотипных ХТП и определению новой структуры технологических потоков для интегрированной ХТС в целом:

1. Увеличить производство перегретого пара и водорода на внутренний и внешний экспорт энергоресурсов, т. е. на нужды других ХТС предприятия или других предприятий;
2. Организовать замкнутый водооборотный цикл для сокращения удельного расхода воды из сети водоснабжения и минимизировать сбросы жидких отходов;
3. Исключить избыточные единицы оборудования из системы ректификации многокомпонентной смеси жидких углеводородов в, а также из системы ректификации смеси метанол–вода в ХТС производства метанола интегрированной ХТС совместного производства СЖТ и метанола;
4. Обосновать возможность разделения многокомпонентной смеси жидких углеводородов в одной ректификационной колонне (в индивидуальной ХТС производства СЖТ используются 2 колонны), а разделения смеси метанол–вода – только в двух колоннах (в индивидуальной ХТС производства метанола применяются 3 колонны);
5. Уменьшить значение парового числа в первой ректификационной колонне системы ректификации смеси метанол–вода в интегрированной ХТС, что позволяет снизить тепловые нагрузки для кипятильника и конденсатора при требуемом качестве целевого продукта.

Реализация результатов работы. Разработанное автором специальное методическое обеспечение, применено для построения блочных компьютерных моделей и компьютерного анализа энергоресурсоэффективности с использованием комплекса программ «СНЕМСАД» для следующих ХТС: производства СЖТ из природного газа; производства метанола из природного газа; интегрированной ХТС совместного производства СЖТ и метанола.

Апробация работы.

Основные научные и практические результаты диссертации докладывались и обсуждались на Международном симпозиуме, посвящённом 175-летию со дня рождения Д. И. Менделеева (Москва, 2009 г.), Международной научно-практической конференции «Логистика и экономика ресурсосбережения и энергосбережения в промышленности». (Самара, 2009 г.), XIX Менделеевском съезде по общей и прикладной химии (Волгоград, 2011 г.), III-ей международной конференции Российского химического общества им. Д. И. Менделеева (Москва, 2011 г.)

Публикации. Основные результаты диссертационной работы отражены в 10 публикациях, в том числе в 2 статьях в изданиях из перечня ВАК.

Объем и структура диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка литературы, а также приложений. Диссертация изложена на 190 страницах, содержит 35 рисунков и 36 таблиц. Список использованной литературы включает 102 наименования.

Оглавление диссертации

Введение

Глава I. Анализ современного состояния научных исследований по компьютерному моделированию сложных химико-технологических систем.

1.1 Общая постановка и актуальность научной задачи компьютерного моделирования сложных ХТС

- 1.2 Аналитический обзор современных комплексов проблемно-ориентированных программ компьютерного моделирования ХТС
- 1.3 Характеристика архитектуры и режимов функционирования комплекса проблемно-ориентированных программ «СНЕМСАД»
- 1.4 Краткий анализ действующих сложных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС производств СЖТ и метанола
- 1.5 Общая характеристика ХТС как объектов блочного компьютерного моделирования
 - 1.5.1 ХТС производства СЖТ из природного газа
 - 1.5.2 ХТС производства метанола из природного газа
- 1.6 Цели и задачи диссертационной работы

Глава II. Разработка и применение логико-вычислительных процедур блочного компьютерного моделирования основных технологических аппаратов энергоресурсоёмких сложных химико-технологических систем

- 2.1 ЛВП блочного компьютерного моделирования химических реакторов
- 2.2 Блочные компьютерные модели различных типов химических реакторов
 - 2.2.1 Компьютерные модели химических реакторов в отделениях парокислородной конверсии ХТС производств синтетического жидкого топлива и метанола
 - 2.2.2 Компьютерные модели химических реакторов каталитического синтеза Фишера-Тропша
 - 2.2.3 Компьютерная модель реактора гидрокрекинга тяжёлых углеводородов в ХТС производства синтетического жидкого топлива
 - 2.2.4 Компьютерная модель химического реактора синтеза метанола
- 2.3 ЛВП блочного компьютерного моделирования ректификационных колонн
- 2.4 Блочные компьютерные модели крупнотоннажных энергоресурсоёмких систем ректификации многокомпонентных смесей
 - 2.4.1 Система ректификации многокомпонентной смеси углеводородов в ХТС производства синтетического жидкого топлива
 - 2.4.2 Система ректификации смеси метанол–вода в ХТС производства метанола
- 2.5 Выводы

Глава III. Разработка эвристическо-вычислительных процедур блочного компьютерного моделирования энергоресурсоёмких сложных химико-технологических систем с применением комплекса программ «СНЕМСАД»

- 3.1 Эвристическо-вычислительная процедура построения блочных компьютерных моделей сложных энергоресурсоёмких ХТС
- 3.2 Алгоритм ускорения сходимости расчётов многомерных нелинейных систем алгебраических и трансцендентных уравнений математических моделей
- 3.3 Результаты блочного компьютерного моделирования сложной ХТС производства СЖТ
- 3.4 Результаты блочного компьютерного моделирования сложной ХТС производства метанола
- 3.5 Выводы

Глава IV. Компьютерный анализ энергоресурсоэффективности интегрированной химико-технологической системы совместного производства синтетического жидкого топлива и метанола из природного газа

- 4.1 Эвристическо-вычислительная процедура синтеза энергоресурсоэффективных интегрированных сложных ХТС
- 4.2 Автоматизированный синтез энергоресурсоэффективной интегрированной ХТС совместного производства СЖТ и метанола из природного газа

4.2.1 Предпосылки инженерно-технологического объединения индивидуальных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС производств СЖТ и метанола в интегрированную ХТС

4.2.2 Разработка блочной компьютерной модели интегрированной ХТС совместного производства СЖТ и метанола

4.3 Анализ параметрической чувствительности блочной компьютерной модели интегрированной ХТС

4.4 Разработка научно-обоснованных рекомендаций по изменению технологических режимов отдельных ХТП интегрированной ХТС

4.5 Выводы

Заключение

Глоссарий основных терминов и понятий

Список литературы

Приложение 1. Инструкция пользователя комплекса проблемно-ориентированных программ «СНЕМСАД» для построения блочных компьютерных моделей ХТП и ХТС в целом

Приложение 2. Сравнительный анализ основных технологических показателей энергоресурсоэффективности индивидуальных ХТС и интегрированной ХТС совместного производства СЖТ и метанола

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновываются: актуальность научных исследований по блочному компьютерному моделированию сложных ХТС с использованием комплексов проблемно-ориентированных программ. Формулируется цель диссертационной работы и решаемые в ней задачи, излагаются научная новизна, научная значимость и практическая значимость полученных теоретических результатов.

В первой главе «Анализ современного состояния научных исследований по компьютерному моделированию сложных ХТС» изложена общая постановка научной задачи компьютерного моделирования сложных ХТС, проанализированы процедуры построения компьютерных моделей ХТС и методы оптимизации ХТС, а также методы автоматизированного синтеза оптимальных энергоресурсосберегающих ХТС. Представлен аналитический обзор научных трудов по современным инструментальным комплексам проблемно-ориентированных программ, которые широко используются для компьютерного моделирования сложных ХТС в различных государствах. Проведён краткий анализ существующих ХТС производства СЖТ и ХТС производства метанола из природного газа. Проведён анализ указанных сложных ХТС как объектов блочного компьютерного моделирования. На основе аналитического обзора научных исследований по компьютерному моделированию сложных ХТС сформулированы цели и задачи диссертационной работы.

Вторая глава «Разработка и применение логико-вычислительной процедуры (ЛВП) блочного компьютерного моделирования основных технологических аппаратов энергоресурсоёмких сложных ХТС» посвящена разработке ЛВП блочного компьютерного моделирования различных типов химических реакторов и колонн ректификации с взаимосвязанными внутренними тепловыми потоками в одном аппарате на основе комбинации стандартных расчётных модулей комплекса программ «СНЕМСАД» с целью использования указанных моделей при компьютерном моделировании сложных ХТС. Приведены результаты реализации

указанных ЛВП для компьютерного моделирования химических реакторов и колонн ректификации ХТС производств СЖТ и метанола из природного газа.

Автором предложена **логико-вычислительная процедура блочного компьютерного моделирования химических реакторов**, при построении блочных компьютерных моделей сложных ХТС, описание которой подробно изложено в диссертации.

При блочном компьютерном моделировании химических реакторов как элементов сложных ХТС автором предложена *методика перехода от использования в сложных математических моделях вместо уравнений констант равновесия к заданным значениям конверсий базовых реагентов включающая следующие этапы:*

1. Расчёт значений равновесных концентраций компонентов. Если в химическом реакторе протекает несколько реакций и достигается равновесие, то мольный расход i -ого компонента на выходе из реактора, соответствующий равновесному, определяется по уравнению:

$$N_i = N_i^{(0)} - \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \varepsilon_j \quad (i = 1, \dots, m) \quad (1)$$

где $N_i^{(0)}$ – мольный расход i -го на входе в реактор, α_{ij} – стехиометрический коэффициент i -го компонента для j -й реакции, ε_j – глубина протекания j -й реакции, m – количество компонентов, n – количество реакций.

Константа равновесия j -й реакции рассчитывается по формуле:

$$\frac{\prod_i^{z-k} X_i^{v_i}}{\prod_i X_i^{v_i}} = k_p^0 \left(\frac{p}{p^0} \right)^{-\Delta v_j} \quad (j = 1, \dots, n) \quad (2)$$

где X_i – мольная доля i -го компонента, \bar{a} – коэффициенты уравнения зависимости константы равновесия от температуры, k – количество реагентов для j -ой реакции, z – количество компонентов для j -ой реакции, p – давление в реакторе, p^0 – атмосферное давление, Δv_j – изменение стехиометрических коэффициентов веществ для j -ой реакции. k_p^0 определяется по эмпирическому уравнению константы равновесия $k_p^0 = f(\bar{a}, T)$. Для реактора, в котором в изотермическом режиме протекают n независимых обратимых реакций, система уравнений относительно глубин протекания реакций записывается в следующем виде (константа равновесия выражена через мольные доли веществ):

$$\prod_i^{z-k} \left\{ \frac{N_i^{(0)} - \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \varepsilon_j}{\sum_{i=1}^m [N_i^{(0)} - \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \varepsilon_j]} \right\}^{v_i} \left(\prod_i^k \left\{ \frac{N_i^{(0)} - \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \varepsilon_j}{\sum_{i=1}^m [N_i^{(0)} - \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \varepsilon_j]} \right\}^{v_i} \right)^{-1} = f(\bar{a}, T) \left(\frac{p}{p^0} \right)^{-\Delta v_j} \quad (j = 1, \dots, n) \quad (3n)$$

При решении системы уравнений (3n) методом Ньютона-Рафсона определяются глубины протекания всех реакций, после чего рассчитывается равновесный состав по уравнению (1).

2. Расчёт значений равновесных конверсий.

При известных равновесных конверсиях базовых реагентов возможно проводить компьютерное моделирование химических реакторов с использованием вышеуказанной процедуры блочного компьютерного моделирования химических реакторов с заданием конверсий базовых реагентов.

Программная реализация таких моделей приводит к существенному снижению сложности системы уравнений математического описания, а, следовательно, к более

быстрой сходимости расчётов в сравнении с использованием математических моделей химических реакторов, в которые входят уравнения температурных зависимостей констант равновесия химических реакций, что является актуальным при компьютерном моделировании сложных ХТС.

Разработанная автором методика перехода от сложных к простым математическим моделям химических реакторов реализована на примере расчёта химического процесса первичного парового риформинга с высокой точностью (средняя ошибка – 0.15 %).

Следует отметить, что для большинства промышленных реакторов, как правило, химическое равновесие не достигается. Если равновесие в реакторе не достигнуто, то найденные по вышеуказанной методике значения конверсий базовых реагентов следует умножить на корректирующие коэффициенты, так называемые степени недостижения равновесия или степени приближения к равновесию, справедливые для данного типа реактора и для заданных значений входных параметров потоков – температуры, давления, расхода сырья, а также типа катализатора и др. Значения корректирующих коэффициентов или произведений степеней конверсий на корректирующие коэффициенты (в дальнейшем их будем называть просто «конверсиями») определяются, исходя по экспериментальным данным.

Предложенная автором методика перехода при моделировании химических реакторов от использования уравнений температурных зависимостей констант равновесия химических реакций и степеней недостижения равновесия к уравнениям с заданной конверсией базовых реагентов практически применена при компьютерном моделировании химического реактора синтеза Фишера–Тропша (средняя ошибка – 1.24 %).

Для блочного компьютерного моделирования химических реакторов автором предложен алгоритм, отличающийся использованием данных о температурных зависимостях констант равновесия при различных степенях приближения к равновесию, величины которых определяются аппроксимацией их значений в гомологических рядах компонентов, в частности углеводородов.

Блок-схема алгоритма расчёта параметров уравнения температурной зависимости констант равновесия для параллельных реакций с учётом принадлежности продуктов к одному гомологическому ряду изображена на рисунке 1.

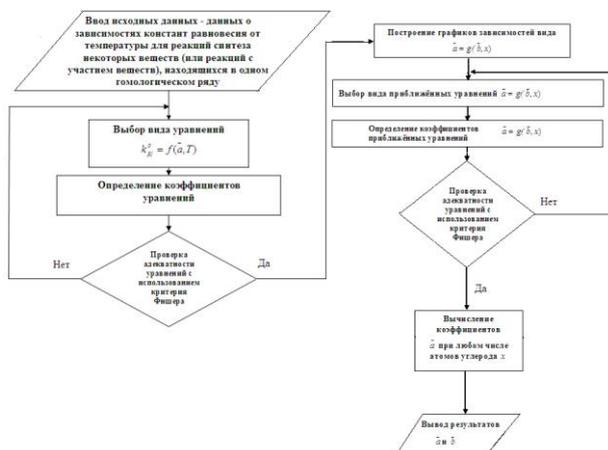


Рисунок 1. Блок-схема алгоритма расчёта параметров уравнения температурной зависимости констант равновесия для параллельных реакций с учётом принадлежности продуктов к одному гомологическому ряду

Оригинальность этого алгоритма состоит в его применимости для расчёта параметров температурной зависимости констант равновесия для большого количества параллельных органических реакций синтеза различных веществ одного гомологического ряда.

Разработанный алгоритм практически использован для расчёта коэффициентов температурных зависимостей констант равновесия для параллельных каталитических реакций синтеза Фишера–Тропша (СФТ):



(реакция (4) протекает при давлении 31 бар и температуре 210–260 °С).

Разработанная процедура блочного компьютерного моделирования химических реакторов при компьютерном анализе сложных ХТС с применением комплекса программ «CHEMCAD», практически применена для компьютерного моделирования различных типов реакторов: получения синтез-газа (смеси оксидов углерода и водорода), СФТ, синтеза метанола, а также гидрокрекинга тяжёлых углеводородов.

Разработанная блочная компьютерная модель подсистемы получения синтез-газа с тремя химическими реакторами изображена на рисунке 2.

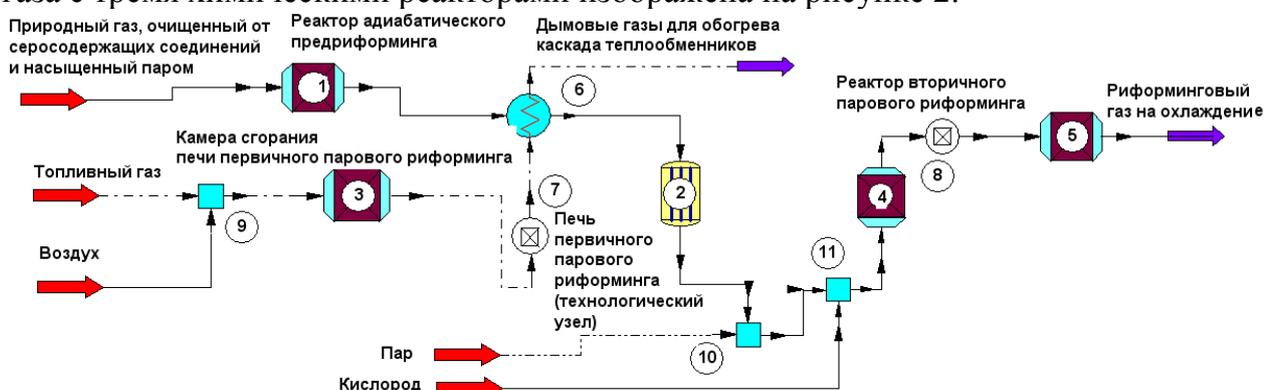


Рисунок 2. Блок-схема блочной компьютерной модели подсистемы получения синтез-газа в отделении парокислородной конверсии: 1–5 – модули расчёта равновесных реакторов; 6 – модуль расчёта теплообменника; 7, 8 – модули статического контроллера; 9–11 – модули смесителей

Расчётные данные о параметрах технологических потоков (входного и выходного) реактора вторичного парового риформинга представлены в таблице 1 (средняя ошибка – 10%).

Подсистема СФТ состоит из трех последовательно соединенных каскадов. Один реактор СФТ моделируется с помощью трех модулей равновесных реакторов с заданными конверсиями базовых реагентов.

Потоки охлаждающей воды в межтрубном пространстве каждого реактора моделируются с помощью типовых расчётных модулей теплообменников. Процесс теплопередачи моделируется с помощью расчётных модулей статических контроллеров, представляющих собой модули передающие информацию о рассчитанном потоке или об оборудовании другому модулю. Аналогично разработаны блочные компьютерные модели реактора синтеза метанола и реактора гидрокрекинга.

Разработанные автором блочные компьютерные модели химических реакторов с учётом интеграции тепловых потоков использованы при компьютерном моделировании сложных ХТС производства СЖТ и ХТС производства метанола из природного газа.

Таблица 1. Результаты расчёта параметров технологических потоков (входного и выходного) реактора вторичного парового риформинга.

| Свойство потока | Входной поток (расчётные данные) | Выходной поток | |
|--------------------------|----------------------------------|------------------|--------------------------|
| | | Расчётные данные | Экспериментальные данные |
| $t, ^\circ\text{C}$ | 700 | 958 | 950 |
| $p, \text{бар}$ | 40 | 39 | 38 |
| $W, \text{м}^3/\text{ч}$ | 152952 | 206968 | 207855 |
| $\omega, \text{об. \%}$ | | | |
| O_2 | 10.05 | – | – |
| H_2 | 31.19 | 44.25 | 47.31 |
| CO | 3.92 | 13.27 | 14.53 |
| CO_2 | 5.18 | 5.79 | 5.63 |
| N_2 | 0.26 | 0.74 | 0.74 |
| H_2O | 33.71 | 33.09 | 30.94 |
| CH_4 | 15.59 | 2.85 | 0.86 |

Предложенная в диссертации *ЛВП блочного компьютерного моделирования ректификационных колонн* практически применена для компьютерного расчёта 2-х колонной системы ректификации нефтяных фракций в ХТС производства СЖТ, а также расчёта 3-х колонной системы ректификации ХТС производства метанола.

Приведённые в диссертации методики и ЛВП для построения блочных компьютерных моделей химических реакторов и ректификационных колонн могут быть применены для компьютерного моделирования различных типов химических реакторов, в том числе сложных (реакторов с рубашкой, печей и т. д.), простых и сложных колонн ректификации, в том числе колонн с боковыми отпарными секциями, циркуляционным орошением, а также с боковыми отборами. Кроме того, они позволяют разрабатывать блочные компьютерные модели четырёх типов конденсаторов и трёх типов кипятильников. Следует отметить, что кипятильники, конденсаторы, боковые отпарные секции и потоки циркуляционного орошения колонн ректификации можно моделировать с помощью отдельных модулей.

Третья глава «Разработка ЭВП блочного компьютерного моделирования энергоресурсоёмких сложных ХТС» посвящена разработке научно-обоснованной процедуры построения блочных компьютерных моделей сложных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС, (рисунок 3), которая обеспечивает возможность вычислений при отсутствии всех необходимых данных о свойствах веществ и смесей, а также параметров ХТП; моделирования процессов в аппаратах ХТС при ограниченном наборе технологических данных, в частности, кинетических констант при расчётах химических реакторов и колонн ректификации с использованием специальной комбинации стандартных модулей комплекса программ CHEMCAD, включая статические контроллеры.

Автором предложен алгоритм ускорения сходимости расчётов систем уравнений математических моделей отдельных ХТП и ХТС в целом, который включает 3 итерационных цикла расчётов: по отдельным аппаратам, по рециклам для отдельных подсистем ХТС (внутренние рециклы для каждой подсистемы), по

рециклом между отделениями ХТС. Для достижения сходимости в каждом из указанных циклов расчётов предусмотрены следующие возможные операции: коррекция начальных приближений для расчётов; вариация параметров ускорения сходимости, например, демпфирующих факторов и т. д.; выбор различных численных методов расчёта систем уравнений.

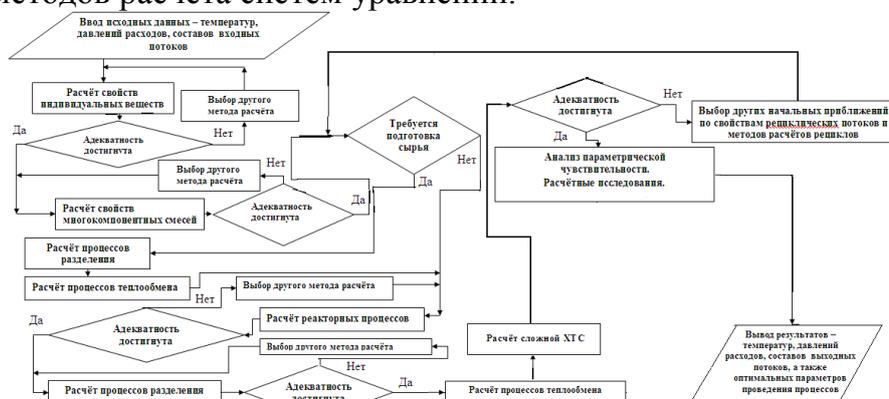


Рисунок 3. Блок-схема процедуры построения блочных компьютерных моделей сложных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС с использованием инструментального комплекса программ CHEMCAD

Предложенный алгоритм ускорения сходимости практически применён для моделирования реакторов с рубашкой, печей и автотермических реакторов, а также простых и сложных колонн ректификации, как элементов сложных ХТС.

Разработанные автором процедура (рисунок 3) и алгоритм практически применены для блочного моделирования 2-х индивидуальных сложных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС производств – ХТС производства СЖТ (5 подсистем) и ХТС производства метанола (4 подсистемы). Адекватность разработанных блочных компьютерных моделей этих сложных ХТС производств проверена по экспериментальным данным.

В четвёртой главе «Компьютерный анализ энергоресурсоэффективности интегрированной ХТС совместного производства СЖТ и метанола из природного газа» изложена **эвристическо-вычислительная процедура синтеза интегрированных сложных крупнотоннажных ХТС** (см. рисунок 4) на основе использования многостадийного эвристическо-эволюционного метода синтеза ХТС, предложенного Кафаровым В. В. И Мешалкиным В. П. Автором предложены изменения структуры рециклов в интегрированной ХТС по сравнению с индивидуальными ХТС. Описаны результаты анализа параметрической чувствительности компьютерной модели интегрированной ХТС. Предложены научно-обоснованные рекомендации по изменению параметров технологических режимов некоторых основных аппаратов в системах ректификации в синтезированной интегрированной ХТС.

Отличительная особенность разработанной автором процедуры компьютерного синтеза состоит в возможности синтеза интегрированных ХТС в результате комбинирования ХТП двух и более исходных индивидуальных ХТС, если они имеют в своей структуре хотя бы одну общую подсистему; проведения реконструкций общих отделений при увеличенных значениях производительностей по выпуску химических продуктов подсистем индивидуальных ХТС.

Разработанная в диссертации ЭВП применена для автоматизированного синтеза интегрированной ХТС совместного производства СЖТ и метанола из природного газа (подробно изложено в диссертации).

Значения удельных расходов воды и энергоресурсов для индивидуальных ХТС производств СЖТ и метанола и для синтезированной автором интегрированной ХТС приведены в таблице 2.

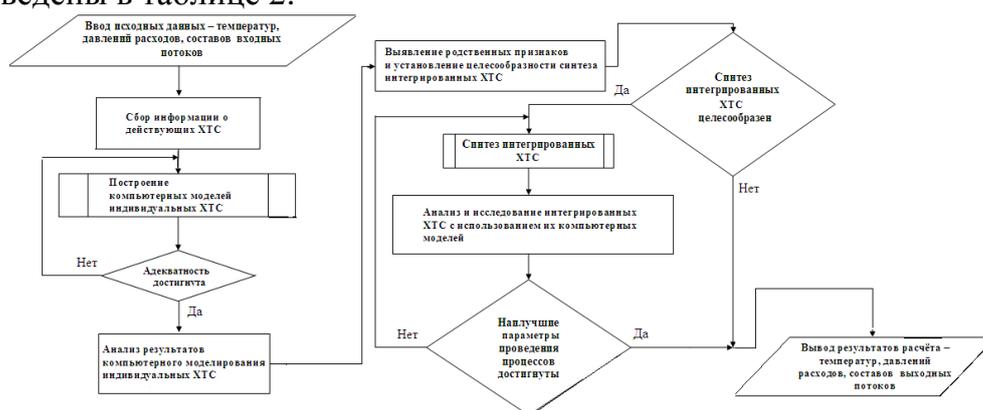


Рис. 4. Блок-схема ЭВП компьютерного синтеза интегрированных сложных крупнотоннажных ХТС

Таблица 2. Удельные расходы воды и энергоресурсов для индивидуальных ХТС и для интегрированной ХТС.

| Показатель работы | ХТС производства СЖТ | ХТС производства метанола | Суммарный показатель работы для индивидуальных ХТС производств СЖТ и метанола | Интегрированная ХТС совместного производства СЖТ и метанола |
|---|----------------------|---------------------------|---|---|
| Удельный расход воды; т/ч на т. продукта(ов) | | | | |
| $G_{\text{воды}}$; | 6.37 | 1.96 | 8.33 | 0.36 |
| Удельные расходы сточных вод ; т/ч с т. готового(ых) продукта(ов) | | | | |
| $G_{\text{сточных вод}}$; | 0.82 | 0.55 | 1.37 | 0.0001 |
| Удельные энергозатраты; МДж/ч на т. продукта(ов) | | | | |
| $Q_{\text{сумм.}}$; | 69254 | 16321 | 85575 | 30005 |

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ:

1. Выполнен аналитический обзор современных научных исследований по компьютерному моделированию сложных ХТС, который показал, что в настоящее время не существует научно-обоснованного методического обеспечения для разработки блочных компьютерных моделей ХТП и сложных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС, необходимых для решения задач анализа, оптимизации и проектирования производств НГХК;

2. Проведён сравнительный анализ современных комплексов проблемно-ориентированных программ для компьютерного моделирования ХТС, который установил:

- несущественное отличие используемого программного интерфейса, количества типовых расчётных модулей ХТП и алгоритмов, применяемых для решения различных систем уравнений математических моделей;
- целесообразность использования для компьютерного моделирования сложных ХТС комплекса программ «СHEMCA3D», имеющего следующие основные достоинства: «дружественный» интерфейс, простота применения в работе,

достаточное для описания физико-химической сущности типовых ХТП количество типовых расчётных модулей и надёжная сходимость алгоритмов;

3. Разработана научно-обоснованная эвристическо-вычислительная процедура построения блочных компьютерных моделей сложных крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС, отличающаяся возможностью гибко использовать комбинации типовых (стандартных) расчётных модулей комплекса программ «СНЕМСАД» и обеспечивать требуемую точность вычислений;

4. Предложен алгоритм ускорения сходимости расчётов многомерных нелинейных систем алгебраических и трансцендентных уравнений математических моделей ХТП и ХТС, отличающийся применением комбинаций блочных компьютерных моделей ХТП и ХТС с возможностью научно-обоснованного выбора значений начальных приближений и демпфирующих факторов для обеспечения быстрой сходимости и практически необходимой точности расчётов;

5. Разработаны оригинальные ЛВП построения блочных компьютерных моделей различных типов химических реакторов и ректификационных колонн, которые используются для блочного компьютерного моделирования сложных ХТС в целом.

Указанные процедуры с использованием комбинации стандартных расчётных модулей комплекса программ «СНЕМСАД» практически применены для компьютерного моделирования различных типов технологических аппаратов: химических реакторов с рубашкой, автотермических химических реакторов, печей (химических реакторов, содержащих камеру сгорания и использующих теплоту реакции горения для проведения эндотермических процессов), а также простых и сложных колонн ректификации;

6. Для блочного компьютерного моделирования различных типов химических реакторов предложен оригинальный алгоритм, отличающийся использованием данных о температурных зависимостях констант равновесия при различных степенях приближения к равновесию, величины которых определяются аппроксимацией их значений в гомологических рядах компонентов;

7. Предложена эвристическо-вычислительная процедура синтеза энергоресурсосберегающих интегрированных сложных ХТС на основе комбинирования самостоятельно функционирующих индивидуальных ХТС, отличающаяся использованием взаимного сочетания общих технологических и химических особенностей функционирования ХТП, которые входят в структуры индивидуальных ХТС;

8. Предложено специальное методическое обеспечение блочного компьютерного моделирования сложных крупнотоннажных ХТС использованы для разработки блочных компьютерных моделей двух крупнотоннажных энергоресурсоёмких ХТС производств: СЖТ из природного газа, метанола из природного газа, а также интегрированной ХТС совместного производства синтетического жидкого топлива и метанола из природного газа;

9. Предложены научно-обоснованные варианты инженерно-технологического оформления отдельных ХТП, оптимальные значения параметров некоторых основных технологических аппаратов и изменения структуры рециклов в синтезированной интегрированной ХТС совместного производства СЖТ и метанола из природного газа, имеющей меньшее значение удельной энергоресурсоёмкости по сравнению с индивидуальными ХТС.

-----***-----

По мнению автора, диссертация является научно-квалификационной работой, в которой изложены научно-обоснованные инженерно-технические разработки по

созданию методического обеспечения блочного компьютерного моделирования сложных крупнотоннажных энергоресурсоёмких химико-технологических систем, имеющие существенное значение для повышения экономической эффективности нефтегазохимического комплекса страны.

Основные работы, опубликованные по теме диссертации

В изданиях перечня ВАК

1. Гартман Т. Н., Советин Ф. С., Лосев В. А., Дробышевский Н. А., Хворостяный В. С. Разработка компьютерной модели многостадийного производства СЖТ из природного газа // «Химическая промышленность сегодня», 2009 г. № 1. Стр. 40–50.
2. Гартман Т. Н., Советин Ф. С., Новикова Д. К. Опыт применения программы CHEMCAD для моделирования реакторных процессов // «Теоретические основы химической технологии», 2009 г. Том 43, № 6. Стр. 702–712.

В других изданиях

3. Гартман Т. Н., Советин Ф. С. Разработка компьютерной модели технологического процесса для проектирования энерго- и ресурсосберегающего производства СЖТ из природного газа // Труды международного симпозиума, посвящённого 175-летию со дня рождения Д. И. Менделеева. Москва, 23–24 апреля 2009 г. Том 2. Стр. 109–116.
4. Гартман Т. Н., Советин Ф. С. Применение пакетов моделирующих программ для разработки компьютерных моделей ресурсосберегающих и экологически безопасных химических производств // Труды 4-ой Международной научно-практической конференции «Логистика и экономика ресурсосбережения и энергосбережения в промышленности» (21-23 сентября 2009 г.). Самара 2009. Стр. 84-86.
5. Гартман Т. Н., Советин Ф. С., Новикова Д. К. Разработка компьютерной модели технологического процесса для проектирования энерго- и ресурсосберегающего производства метанола из природного газа // «Химическая техника», 2009 г. № 12. Стр. 29–31.
6. Гартман Т. Н., Советин Ф. С. Компьютерное моделирование технологического узла ректификации производства метанола с применением пакетов программ CHEMCAD // «Химическая техника», № 4. 2010 г. Стр. 12–14.
7. Гартман Т. Н., Советин Ф. С., Новикова Д. К., Сеннер С. А. Синтез интегрированной ХТС получения СЖТ и метанола из природного газа с применением проблемно-ориентированного комплекса программ CHEMCAD // «Химическая техника», № 9. 2011 г. Стр. 41–44.
8. Гартман Т. Н., Советин Ф. С. Логико-вычислительная процедура блочного компьютерного моделирования сложных реакторных систем. // Сборник тезисов XIX Менделеевского съезда. Волгоград, 25–30 сентября 2011 г. Т. 3. Стр. 417.
9. Гартман Т. Н., Советин Ф. С. Принципы разработки ресурсосберегающих и энергоэффективных химических производств с применением комплексов моделирующих программ. // Сборник тезисов докладов III-ей международной конференции Российского химического общества им. Д. И. Менделеева. Москва, 25 октября 2011 г. Стр. 32–33.
10. Советин Ф. С., Гартман Т. Н. Логико-вычислительная процедура блочного компьютерного моделирования сложных ректификационных систем // Сборник научных трудов «Успехи в химии и химической технологии». – Москва, РХТУ им. Д. И. Менделеева 2011 г. Т. XXV, №13 (129). – С. 71-74.

В перечисленных совместных работах лично Советиным Ф. С. предложены: ЭВП блочного компьютерного моделирования сложных крупнотоннажных

энергоресурсоёмких ХТС с применением комплекса программ CHEMCAD [9], методика практического применения этой ЭВП – в [1, 3, 4, 5]; ЛВП блочного компьютерного моделирования химических реакторов [8], а методика практического применения этой ЛВП – в [2]; ЛВП блочного компьютерного моделирования колонн ректификации [10], а методика практического применения этой ЛВП – в [1, 6]; методика практического применения ЭВП синтеза интегрированных крупнотоннажных ХТС в [7].

-----***-----

В заключение автор считает своим приятным долгом выразить свою глубокую благодарность научному руководителю – профессору д.т.н., Гартману Томашу Николаевичу, а также научному консультанту – члену-корреспонденту РАН, профессору, д.т.н., Мешалкину Валерию Павловичу за постоянное внимание и ценные научно-методические консультации, поддержку и активизацию научных исследований.

Автор благодарит инженерно-технических работников ОАО «ЩёкиноАзот» за проявление интереса к результатам диссертационной работы

Автор благодарит всех преподавателей кафедры информатики и компьютерного проектирования РХТУ им. Д. И. Менделеева за доброжелательную поддержку и плодотворные научные дискуссии по результатам диссертационной работы.

Список основных сокращений:

ХТП – химико-технологический процесс

ХТС – химико-технологическая система

СЖТ – синтетическое жидкое топливо

СФТ – синтез Фишера-Тропша

НГХК – нефтегазохимический комплекс

ЛВП – логико-вычислительная процедура

ЭВП – эвристическо-вычислительная процедура

Редактор: Заходякина Н.А.

Заказ № 100

Объем 1,0 п.л.

Тираж 100 экз.

Издательский центр РХТУ им. Д.И. Менделеева