



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова»

С.А. Крылова



ВВЕДЕНИЕ В АНАЛИЗ И СИНТЕЗ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

*Утверждено Редакционно-издательским советом университета
в качестве учебного пособия*

Магнитогорск
2016

Рецензенты:

кандидат технических наук,
ведущий инженер технологической группы КХП,
ОАО «Магнитогорский металлургический комбинат»
Д.А. Кубак

кандидат химических наук,
инженер-химик-технолог,
руководитель отдела оборудования ООО «ТЕКСА»
Р.А. Хафизова

Крылова С.А.

Введение в анализ и синтез химико-технологических систем [Электронный ресурс] : учебное пособие / Светлана Александровна Крылова ; ФГБОУ ВО «Магнитогорский государственный технический университет им. Г.И. Носова». – Электрон. текстовые дан. (1,60 Мб). – Магнитогорск : ФГБОУ ВО «МГТУ им. Г.И. Носова», 2016. – 1 электрон. опт. диск (CD-R). – Систем. требования : IBM PC, любой, более 1 GHz ; 512 Мб RAM ; 10 Мб HDD ; MS Windows XP и выше ; Adobe Reader 8.0 и выше ; CD/DVD-ROM дисковод ; мышь. – Загл. с титул. экрана.

Пособие предназначено для студентов, обучающихся по программам бакалавриата и магистратуры «Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов» направления «Химическая технология» (18.03.01 и 18.04.01) и изучающих дисциплины «Общая химическая технология» и «Анализ и синтез ХТС». В пособии изложены общие характеристики химико-технологических систем (ХТС), задачи, решаемые при проектировании ХТС, общий подход, принципы и методы решения задач анализа и синтеза ХТС.

Учебное пособие может быть также рекомендовано в качестве дополнительной литературы по дисциплине «Основы технологии химического производства» (направление 27.03.01 - Стандартизация и метрология).

УДК 66.011 (075)
ББК 35

Содержание

ВВЕДЕНИЕ	4
УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ	5
1. ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ	6
1.1. Основные понятия и определения	6
1.2. Подсистемы ХТС	8
1.3. Показатели эффективности функционирования ХТС	9
1.4. Классификация ХТС	11
1.5. Разработка ХТС	13
1.6. Классификация моделей ХТС	15
1.7. Типы технологических связей	22
1.8. Свойства ХТС как системы	24
2. АНАЛИЗ ХТС	28
2.1. Задачи анализа ХТС	29
2.2. Эффективность использования материальных ресурсов	30
2.3. Энергетическая и эксергетическая эффективность ХТС	31
2.4. Эффективность организации процесса в ХТС	39
3. СИНТЕЗ ХТС	39
3.1. Методы решения задачи синтеза	40
3.2. Концепции создания ХТС	44
3.2.1. Концепция полного использования сырья	45
3.2.2. Минимизация энергетических и тепловых затрат	49
3.2.3. Минимизация отходов	52
3.2.4. Эффективное использование оборудования	54
КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ	56
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	58
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК	59
ПРИЛОЖЕНИЕ	61

ВВЕДЕНИЕ

Устойчивое социально-экономическое развитие химической отрасли, определенное стратегией инновационного развития России, предусматривает создание ресурсосберегающих экологически безопасных производств, основу которых составляют эффективно действующие химико-технологические системы (ХТС). Современное химическое производство - это сложная ХТС, состоящая из большого количества аппаратов и технологических связей между ними. Для оценки эффективности функционирования химических предприятий наряду с традиционными показателями в настоящее время все шире используются инновационные показатели: доля высокотехнологичной (новой) продукции, гибкость производства, доля экспорта, показатели надежности и безопасности производства, а также показатели воздействия производства на окружающую природную среду, ресурсоемкость продукции и др. Совокупность этих показателей позволяет комплексно оценивать экономическую эффективность деятельности химических предприятий в условиях рынка и необходимости обеспечения устойчивого развития.

Таким образом, при разработке новой ХТС или модернизации существующей, основная задача заключается в создании высокоэффективного химического производства, т.е. такого объекта химической промышленности, который позволит получать продукцию заданного качества в требуемом объеме наиболее целесообразным путем.

Ключом к решению этой задачи является применение научно обоснованной теории анализа и синтеза химико-технологических систем, предполагающей использование в качестве основного метода исследования ХТС математическое моделирование и аппарата исследования - теории систем и ее прикладной части – системного анализа.

Целью настоящего пособия является ознакомление студентов, обучающихся по программе прикладной магистратуры "Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов" с основными понятиями, общим подходом, принципами и методами решения задач анализа и синтеза ХТС. Некоторые разделы пособия могут быть рекомендованы при изучении дисциплины «Общая химическая технология» в качестве основной или дополнительной литературы.

Доступность и логическая последовательность изложения, наглядность приводимых примеров дают возможность заинтересованному читателю овладеть представленным материалом и практически использовать его для решения конкретных задач усовершенствования каких-либо элементов или подсистем ХТС.

Более подробно ознакомиться с теорией и практикой анализа и синтеза ХТС можно по литературе (учебники [1-6] и учебные пособия [7-18]), список которой приводится в конце пособия.

Материал, изложенный в данном пособии, базируется, прежде всего, на знаниях, умениях и навыках, полученных обучающимися в результате изучения дисциплин «Общая химическая технология», «Процессы и аппараты химической технологии», «Химические реакторы», «Моделирование химико-технологических процессов», «Техническая термодинамика и теплотехника», «Основы экономики и управления производством», «Системы управления химико-технологическими процессами», предусмотренных учебным планом программы бакалавриата по направлению 18.03.01 «Химическая технология».

Дисциплина «Анализ и синтез ХТС» является основой для последующего изучения ряда дисциплин магистерской программы по направлению 18.04.01 «Химическая технология»: «Экономический анализ и управление производством», «Системный анализ ХТС и расчет аппаратов технологии природных энергоносителей и углеродных материалов», «Проектирование коксохимических предприятий», «Системы управления химико-технологическими процессами», поэтому представленный материал будет полезен при освоении указанных дисциплин и понимания взаимосвязи между ними.

УСЛОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ И СОКРАЩЕНИЯ

Ниже приводятся в общем виде условные обозначения величин, встречающихся в учебном пособии и их единицы измерения, выраженные через соответствующие единицы международной системы (СИ). Конкретная принадлежность величин к какому-либо веществу, процессу, системе и т.д. поясняется в тексте.

ΔH – энтальпия процесса, Дж;
 D - потери эксергии из-за необратимости протекающих процессов, Дж;
 F – площадь, m^2 ;
 I - полная энергия потока, Дж;
 m – масса, кг;
 n - количество вещества, моль;
 Q – количество теплоты, Дж;
 S – энтропия вещества, Дж/(моль·К);
 S_R – интегральная селективность по целевому продукту R;
 t – время, с;
 V – объем, m^3 ;
 E - эксергия, Дж;
 e - удельная эксергия, Дж/кг;
 E_R – выход продукта R;
 p – давление, Па;
 c_p - удельная теплоемкость, Дж/(моль·К);
 T – температура, К;
 x_i – степень превращения i -го вещества;
Критерии подобия в гидро- и газодинамике:
 Re - Рейнольдса;
 Ar - Архимеда;
Критерии подобия тепловых процессов в жидкостях и газах:
 Pr - Прандтля;
 Nu - Нуссельта;

Сокращения

АСУТП - автоматизированная система управления технологическим процессом;
 I – интенсивность;
 P – производительность;
ХТП – химико-технологический процесс;
ХТС – химико-технологическая система;
КПД (η) – коэффициент полезного действия;
АВС – азото-водородная смесь;
ВЭР – вторичные энергетические ресурсы;
ПДК –предельно допустимая концентрация.

1. ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ

1.1. Основные понятия и определения

Химическое производство представляет собой химико-технологическую систему, в которой осуществляются химико-технологические процессы в определённых аппаратах.

Общая структура химического производства и его функциональные элементы представлены на рис. 1.

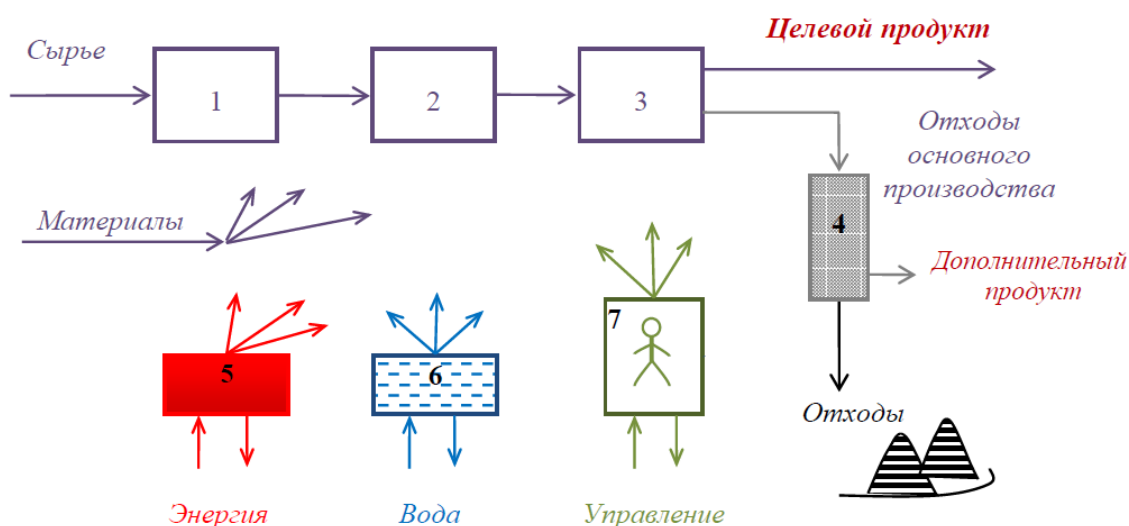


Рис. 1. Структура и функциональные элементы химического производства
1- подготовка сырья; 2- переработка сырья; 3- выделение целевого продукта; 4 - санитарная очистка и утилизация отходов; 5 - энергетическая система; 6 - система подготовки вспомогательных материалов и водоподготовка; 7 - система управления.

Химико-технологический процесс (ХТП) - это совокупность физических, химических и механических операций, проводимых в определенной последовательности с целью переработки исходного сырья в целевой продукт.

ХТП в целом - это сложная система, состоящая из единичных связанных между собой процессов (элементов) и взаимодействующая с окружающей средой.

Единичные процессы (элементы) - это процессы тепло-, массообмена, гидромеханические, химические и т.д.

Химический процесс является важной подсистемой ХТП. Он представляет собой химические реакции, сопровождаемые тепло- и массообменными явлениями.

Система - целостная организованная совокупность взаимодействующих объектов.

Изучение общих свойств систем связано в первую очередь с изучением связей между внутренними частями систем и связей систем с внешним окружением.

Химико-технологическая система (ХТС) - это искусственная техническая система, представляющая собой совокупность физико-химических процессов и средств для их проведения с целью получения продукта заданного качества и в требуемом количестве с минимальными затратами сырьевых и энергетических ресурсов и минимальным воздействием на окружающую среду.

Элемент системы - предельно малая часть системы, деление которой на более “простые” части приводит к исчезновению качества системности.

Элементами ХТС являются все используемые технические средства: оборудование, материалы, комплектующие.

Если в качестве системы рассматривать химическое предприятие, то его элементами можно считать отдельные химические производства или цеха. Если системой является цех или технологическая линия, то их элементами служат отдельные аппараты и агрегаты. При рассмотрении в качестве системы отдельного аппарата, его элементами будут конструкционные узлы (например, тарелки в ректификационной колонне).

Элементы ХТС взаимосвязаны материальными, энергетическими и информационными потоками - *связями*.

Материальный поток - это перемещение веществ в любом фазовом состоянии в пространстве от элемента к элементу в пределах ХТС. Он осуществляется с помощью трубопроводов, газоходов, разнообразных транспортеров и т.п.

Энергетический поток - это поток энергии (тепловой, электрической, световой, электромагнитной и т.п.), который передается к элементу ХТС соответствующими средствами. Например, тепловая энергия может передаваться трубопроводами, если теплоноситель - газ, пар или жидкость; электрическая - проводами, силовыми кабелями; электромагнитная - специальными трактами (волноводами).

Материальные и энергетические потоки относятся к *технологическим* потокам. Кроме технологических, существуют также *информационные потоки*.

Информационный поток - это сигналы в электрической или пневматической (с помощью сжатого воздуха) форме, с помощью которых передается информация о ходе технологического процесса в отдельном элементе ХТС или его узле, о параметрах материального или энергетического потоков при транспортировке от элемента к элементу, а также команды для управления рабочими (исполнительными) устройствами.

Информационные потоки используются в системах контроля и управления процессами и производством.

Число элементов и последовательность их участия в производственном процессе, направления связей между элементами характеризуют *структуру* ХТС.

Структурность, т.е. внутренняя сложность и организованность является важнейшим свойством систем, собственно "делающих системы системами". Это проявляется в первую очередь в структурной *иерархии* (соподчинении) систем. Каждая ХТС состоит из функционально взаимосвязанных *подсистем*.

Подсистема - группа элементов, обладающих определенной целостностью и целенаправленностью.

Понятия "система" и "подсистема" относительны, т.е. система может быть подсистемой другой системы более крупного масштаба (см. ниже масштабные подсистемы).

Чтобы судить о свойствах ХТС, показателях ее функционирования, необходимо определить состояние ХТС.

Состояние (режим) ХТС определяется параметрами потоков (связей) и состоянием аппаратов (элементов).

Процесс функционирования ХТС рассматривается как последовательная смена состояний в системе в некотором интервале времени.

Параметры потоков – химические, физико-химические и физические данные о потоке. К ним относятся:

- параметры состояния: количество потока между элементами в единицу времени, фазовый состав, химический состав, температура, давление, теплосодержание;
- параметры свойств: теплоемкость, плотность, вязкость и др.

Состояние элемента включает данные, от которых зависит изменение показателей потока в элементе, например:

- регулирующие воздействия – температура хладагента, отводящего теплоту из реактора, или подача пара в паровую турбину и т.д.;
- изменяемые при эксплуатации характеристики аппарата и условия процесса

вследствие снижения активности катализатора, загрязнения поверхности теплообменника и т.д.

Расчет ХТС - определение параметров потоков в ХТС заданной структуры и с заданным состоянием ее элементов. Расчет проводится на основе законов сохранения массы и энергии.

Расчёты - главное средство анализа, оценки свойств и синтеза ХТС. Поскольку расчет всей ХТС является сложной и многовариантной задачей, методы расчёта разбивают на блоки в соответствии со спецификой решаемых задач.

В настоящее время расчётные алгоритмы достаточно хорошо разработаны и структурированы по видам, структуре и назначению элементов и подсистем ХТС. Основными модулями расчетов являются:

- расчёты физико-химических свойств веществ и материалов;
- материальные и тепловые балансы;
- химические и физико-химические равновесия;
- микро- и макрокинетика химических процессов;
- расчёты процессов переноса;
- расчёты транспортных систем;
- расчёты динамики и оценка свойств элементов и подсистем ХТС;
- технико-экономические расчёты.

Все расчёты выполняют с целью оптимизации общих технико-экономических показателей ХТС.

1.2. Подсистемы ХТС

Выделение подсистем можно проводить по двум признакам:

- функциональному;
- масштабному.

Функциональные подсистемы обеспечивают выполнение функций производства и его функционирование в целом.

Функциональные подсистемы делят на:

- технологические;
- энергетические;
- управления (рис.2).

Совокупность функциональных подсистем образует *состав ХТС*.

Технологическая подсистема	• часть производства, где осуществляется переработка сырья в продукты - химико-технологический процесс (ХТП)
Энергетическая подсистема	• часть производства, обеспечивающая ХТП энергией
Подсистема управления	• часть производства, с помощью которой осуществляется получение информации о его функционировании и управлении. Обычно это АСУТП

Рис. 2. Функциональные подсистемы ХТС

Масштабные подсистемы можно систематизировать в виде их иерархической последовательности (рис.3).

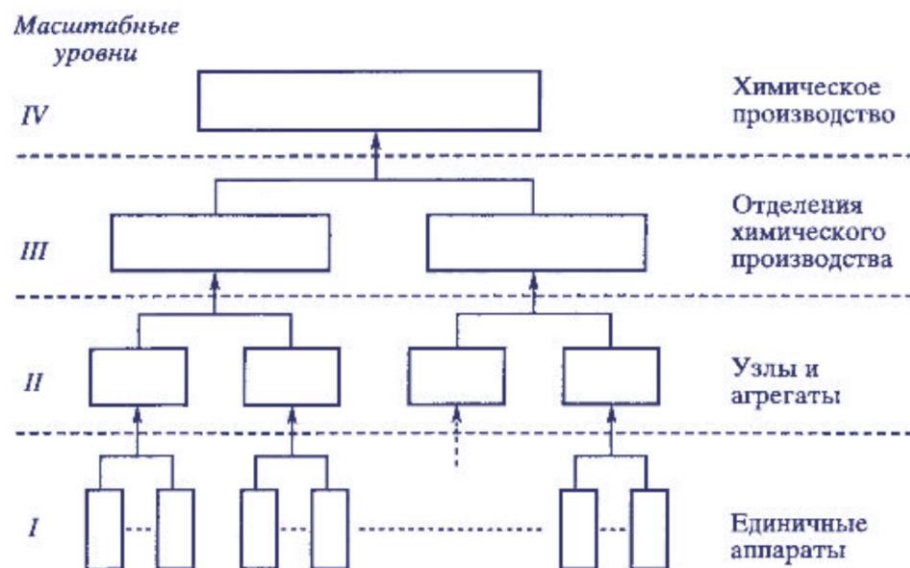


Рис. 3. Иерархическая структура ХТС

Первую (низшую ступень) структуры ХТС составляют типовые химико-технологические процессы – химические, тепловые, механические, гидродинамические, диффузионные и др., осуществляемые в соответствующих аппаратах.

Вторая ступень структуры - это агрегаты и комплексы, представляющие взаимосвязанную совокупность типовых технологических процессов и аппаратов, осуществляющих определённую операцию (цех или его отдельный участок).

Третья ступень включает несколько различных цехов, где получают целевые продукты. Кроме основных цехов, производство может включать и вспомогательные цеха, связанные с функционированием основных цехов. Например, ремонтно-механический цех, цех водоподготовки, электроцех и др.

Четвёртая ступень – химическое предприятие в целом.

Различные уровни структуры химического предприятия связаны между собой отношениями соподчинённости (вертикальные связи). Кроме того, существует взаимосвязь и между элементами внутри одного и того же уровня (горизонтальные связи).

Таким образом, ХТС представляет собой модель химического производства или химико-технологического процесса (ХТП), которая отображает его структуру и позволяет предсказывать те или иные свойства и показатели.

1.3. Показатели эффективности функционирования ХТС

Показатели эффективности функционирования ХТС подразделяются на следующие:

- технические;
- экономические;
- эксплуатационные;
- социальные.

Производительность – количество целевого продукта (G), производимое в единицу времени или переработанного сырья в единицу времени:

$$П = G / t \quad (1)$$

Единицы измерения - кг/час, т/сут, т/год и т.п.

Мощность - максимально возможная производительность.

Интенсивность - это производительность, отнесенная к какой-либо величине, характеризующей размеры аппарата - к его объему (V) или сечению (F):

$$И = \frac{П}{V(или F)} = \frac{G}{V(или F) \cdot t} \quad (2)$$

Единицы измерения - кг/(час·м³), т/(сут·м²) и т.п.

Степень превращения сырья (x_i) - отношение количества превратившегося исходного сырья i ($n_{i0} - n_i$) к его начальному количеству n_{i0} . Например, для вещества А:

$$x_A = \frac{n_{A0} - n_A}{n_{A0}} \quad (3)$$

Степень превращения может принимать значения в пределах $0 \leq x_i \leq 1$.

Селективность (избирательность) полная, или **интегральная**, S_R показывает, какая доля превратившегося исходного вещества расходуется на образование заданного продукта R:

$$S_R = \frac{n_{A \rightarrow R}}{n_A^0 - n_A} \quad (4)$$

$n_A^0 - n_A$ - общее количество прореагировавшего вещества А.

Выход продукта - это отношение количества полученного целевого продукта n_R , к максимально возможному его количеству $n_{R,max}$, которое могло бы быть получено при данных условиях осуществления химической реакции:

$$E_R = \frac{n_R}{n_{R,max}} \quad (5)$$

Удельные капитальные затраты – затраты на оборудование, отнесенные к единице его производительности. Для организации производства необходимы единовременные затраты на аппараты, машины, трубопроводы, сооружения и прочее, т. е. капитальные затраты. Этот технический показатель характеризует эффективность организации процесса и производства в целом, совершенство используемых конструкций и выражается в натуральных величинах (например, [тонна металла/1000 тонн продукта в сутки]) или в денежном выражении.

Качество продукта определяет его потребительские свойства и товарную ценность и оценивается разными характеристиками, такими как содержание (состав и количество) примесей, физические и химические показатели, внешний вид и размеры, цвет, запах и т. д. Устанавливается следующими документами: СТБ, ISO 9001, ГОСТ, ТУ, сертификатом качества.

Экономические показатели

Себестоимость продукции - суммарные затраты на получение единицы продукта. Она включает в себя затраты на сырье, энергию, вспомогательные материалы, капитальные затраты, затраты на оплату труда и др. Себестоимость имеет денежное выражение.

Производительность труда - количество продукции, произведенной в единицу времени (обычно за год) в расчете на одного работающего.

Экономические показатели определяют экономическую эффективность производства.

Экономические показатели рассчитывают на основе технических показателей.

Некоторые из них (производительность, расходные коэффициенты, удельные капитальные затраты) можно представить в денежном выражении. В данном случае такие показатели называют *техничко-экономическими*.

Эксплуатационные показатели

Эксплуатационные показатели характеризуют изменения, возникающие в ХТП при появлении отклонений от регламентированных условий и состояний. Основными эксплуатационными показателями являются надежность, безопасность функционирования, чувствительность, управляемость и регулируемость.

Надежность характеризуют средним временем безаварийной работы либо числом аварийных остановок оборудования за определенный отрезок времени.

Безопасность функционирования – вероятность нарушений, приводящих к нанесению вреда или ущерба обслуживающему персоналу, оборудованию, населению, окружающей среде.

Чувствительность к нарушениям режима и изменению условий эксплуатации; определяется отношением изменения показателей процесса к этим отклонениям.

Управляемость и регулируемость характеризуют возможность поддерживать показатели процесса в допустимых пределах, определяют величину допустимых изменений условий процесса.

Социальные показатели

Социальные показатели определяют комфортность работы на данном производстве и его влияние на окружающую среду.

Безвредность обслуживания следует из сопоставления санитарно-гигиенических условий для обслуживающего персонала с соответствующими нормами по загазованности, запыленности, уровню шума и т. д.

Степень механизации и автоматизации определяет долю ручного и тяжелого труда в эксплуатации производства.

Экологическая безопасность характеризует степень воздействия производства на окружающую среду и экологическую обстановку в регионе.

1.4. Классификация ХТС

Применяемые в химических производствах ХТС классифицируют по двум основным признакам: способу функционирования и целевому назначению, которые в свою очередь делятся на ряд разновидностей (рис.4).

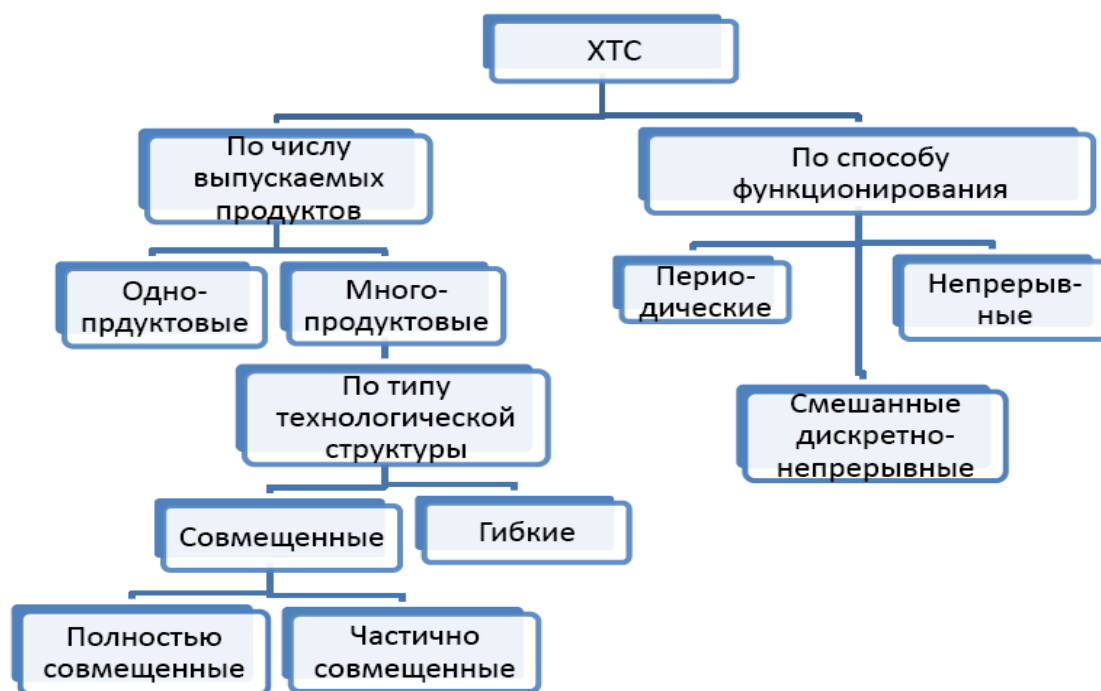


Рис. 4. Классификация ХТС

1. Способ функционирования.

— *Периодические*. В них все элементы, подсистемы и сама ХТС являются системами строго периодического действия. Это самые сложные по характеру изменения параметров и управлению ХТС. Однако это самые гибкие и простые по элементной базе технологические комплексы. В качестве примера такой системы можно привести производство кокса. Цикл работы состоит из загрузки угля в коксовую печь, коксования, выгрузки кокса.

— *Непрерывные*. Характеризуются постоянством своей общей структуры и стационарностью основных входных и выходных параметров. Примером таких ХТС может быть получение метанола из синтеза-газа, производство серной кислоты, синтез аммиака и т.п.

В непрерывных ХТС выделяют особо два вида.

— *Непрерывно-циклические*: в них часть дублированных подсистем работает периодически по строго заданной программе с переключением (системы улавливания, фильтры, испарители, конденсаторы и десублиматоры и т.д.);

— *Непрерывно-периодические*. В этих ХТС часть подсистем работает периодически без резервирования. Непрерывность работы ХТС обеспечивается введением промежуточных буферных ёмкостей, накопителей и т.д.

2. Целевое назначение ХТС.

— *ХТС производства одного продукта*. Это периодические и непрерывные ХТС, предназначенные для производства одного продукта в течение достаточно длительного времени. За время длительной эксплуатации такие ХТС достигают высокой степени совершенства. Однако вследствие узкой специализации они имеют узкий диапазон изменения технических и технологических параметров, т.е. *малоадаптивны*. Поэтому их невозможно приспособить для выпуска новой продукции без серьёзных переделок.

— *Многопродуктовые ХТС*, которые, в свою очередь, подразделяются на два вида:

— совмещенные (с жесткой структурой). Это ХТС периодического типа, предназначенные для реализации фиксированного количества технологических процессов для выпуска разных видов продукции. При этом в данный период времени выпускается лишь один продукт;

— гибкие, в которых технологические маршруты совпадают не полностью, и переход от выпуска одного продукта к выпуску другого сопровождается изменением структуры ХТС. Это также ХТС периодического типа, но предназначенные для реализации нефиксированного множества технологических процессов для выпуска разных видов продукции. Они строятся по блочно-модульному принципу с быстро переключаемыми связями между модулями. Допускают одновременный выпуск нескольких видов продукции.

Применимость совмещенных и гибких ХТС ограничена принципиальными техническими параметрами оборудования: рабочими емкостями; величинами активных поверхностей; коррозионной стойкостью материалов; энергетическими характеристиками.

1.5. Разработка ХТС

Конечная цель разработки ХТС - создание высокоэффективного химического производства, которое позволит получать продукцию заданного качества, в требуемом объеме наиболее экономически, экологически и социально целесообразным путём.

Выпуск химической продукции, соответствующей спросу отечественного и мирового рынков, может быть осуществлен как на новых производствах, созданных на современной технической базе, так и на действующих, технически перевооруженных предприятиях. Задача создания новых производств или повышения эффективности функционирования уже существующих решается в несколько этапов, совершающихся либо одновременно, либо последовательно. При этом возникают три вида научно-исследовательских операций - **анализ, синтез и оптимизация**, проведение которых возможно лишь при наличии математической модели ХТС, которая должна отражать сущность функционирования ХТС как единого целого. Этапы разработки ХТС и связи между ними представлены на рис. 5.

Задачи создания и эксплуатации ХТС удобно рассматривать как многоуровневые с различными уровнями сложности.

На первом уровне этих задач проводится создание математических моделей отдельных элементов и на их основе полной математической модели ХТС. Наряду с этим необходимо выбрать показатели эффективности функционирования ХТС, установить их функциональную зависимость от различных факторов.

На втором уровне переходят к решению задач анализа, синтеза и оптимизации ХТС.

Анализ ХТС состоит в расчете полной математической модели ХТС на основе математических моделей отдельных элементов и технологической топологии (характера и последовательности соединения отдельных аппаратов в технологической схеме) с целью определения параметров выходных технологических потоков при заданных технологических условиях и параметрах входных потоков. При этом полная модель может быть рассчитана после того, как синтезирована ХТС, т.е. анализ не может проводиться в отрыве от синтеза.

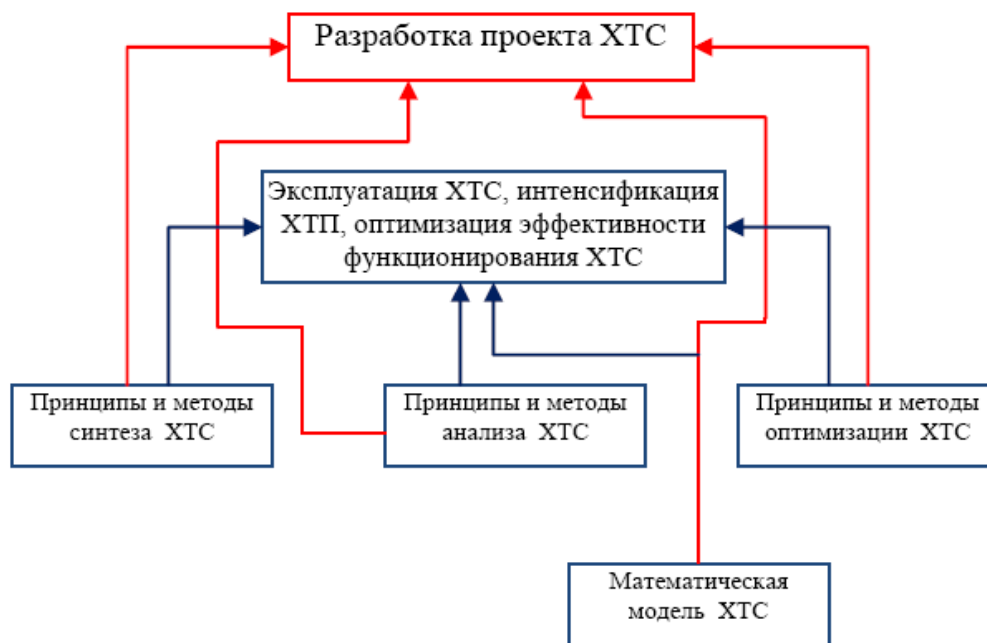


Рис. 5. Основные этапы разработки ХТС

Синтез и построение ХТС заключается в определении основных технологических операций и последовательности их проведения, выборе аппаратов и установлении связей между ними. При этом стремятся выбрать такой режим работы, который обеспечивал бы получение наилучших показателей функционирования ХТС, т.е. синтез ХТС тесно связан с ее оптимизацией.

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

На практике изложенные выше задачи в общих чертах решаются в следующей последовательности. Сначала синтезируется первоначальный вариант ХТС. Далее проводится его полный расчет по соответствующей модели (т.е. проводится анализ ХТС). Наряду с расчетом выходных параметров ХТС определяется значение критерия эффективности. Результаты анализа являются основой для принятия решения на следующем этапе, т.е. при повторном синтезе ХТС, но уже на более высоком уровне. Усовершенствованный вариант снова анализируется, принимаются решения о действиях на следующем этапе и создание еще более усовершенствованного варианта и т.д. Для всех полученных вариантов ХТС сопоставляются значения критериев эффективности функционирования системы. Многократное повторение синтеза и анализа ХТС проводится до тех пор, пока не будут получены оптимальные значения критериев эффективности.

После этого формируются исходные данные на проектирование ХТС. Более подробно с материалами по проектированию можно ознакомиться [5].

В проекте ХТС должны содержаться следующие технические решения.

- 1) Технологическая топология ХТС.
- 2) Диапазоны изменений значений входных переменных, которыми являются физические параметры входных потоков сырья, теплоносителей и т.п., а также параметры окружающей среды, влияющие на процесс функционирования ХТС: температура, давление, влажность и т.п.

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

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

5) Рекомендуемые параметры технологического режима работы элементов ХТС (температуры, давления, тип катализатора, его количество, способ применения, гидродинамический режим и т.п.).

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

и др.

В сочетании принципов анализа, синтеза и оптимизации ХТС на основе математической модели решаются задачи наибольшей степени сложности - интенсификация и оптимизация существующих производств и создание новых производств.

1.6. Классификация моделей ХТС

Для решения задач анализа ХТС необходимо выполнить ее описание. Такое описание проводят с помощью моделей ХТС. Все модели ХТС в зависимости от способа описания можно разделить на качественные (обобщенные) и математические, которые в свою очередь делятся на ряд разновидностей (рис.6).

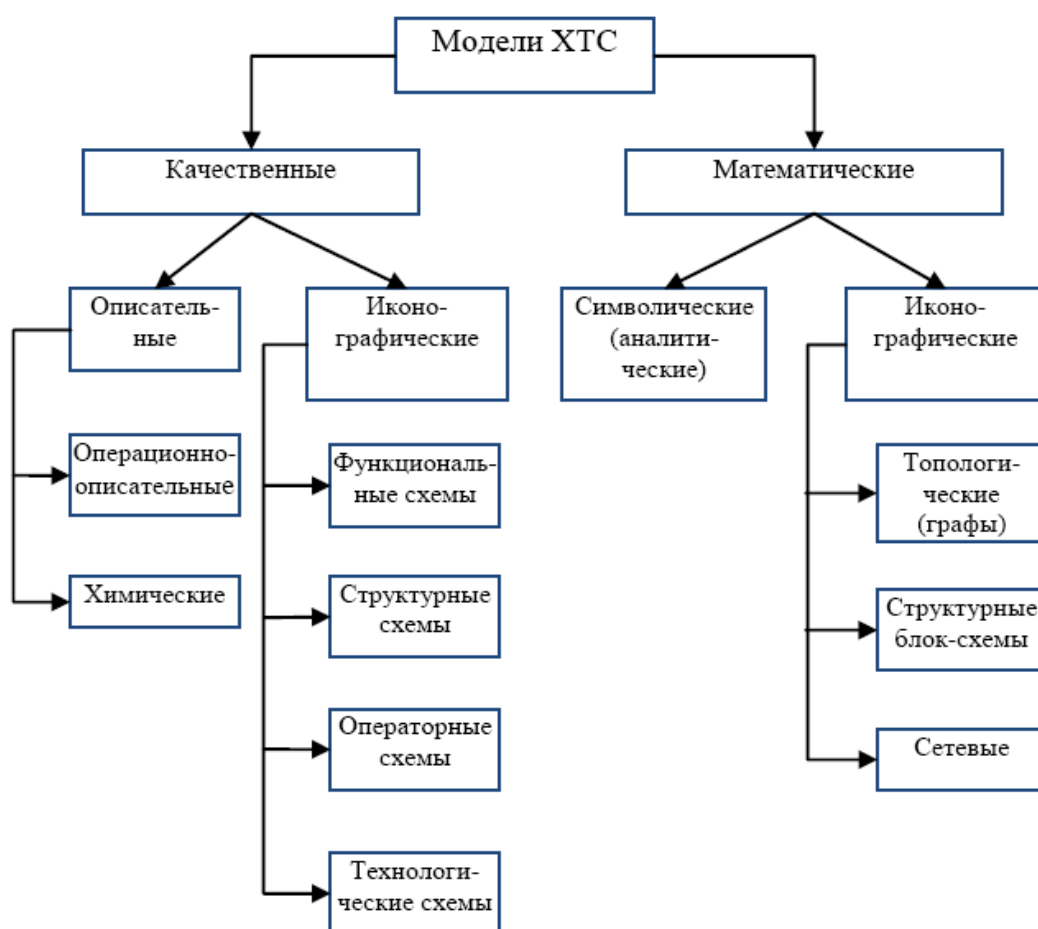


Рис. 6. Классификация моделей ХТС

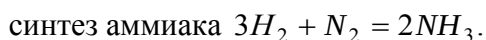
Модель сложной ХТС всегда должна быть компромиссом между достаточной простотой представления процессов и достаточной адекватностью их отражения.

Качественные модели. К качественным моделям относятся описательные - операционно-описательные и химические и иконографические.

Операционно-описательные модели — это словесное описание процесса функционирования системы. В нем приводятся сведения о составе сырья, значениях параметров технологического режима и т.п. На практике операционно-описательная модель — это различные виды проектно-конструкторской документации, технологические регламенты, расчетно-пояснительные записки и др.

В химической модели приводятся уравнения всех химических реакций (как целевых, так и побочных), которые проходят в данной ХТС.

Например, синтез аммиака из природного газа (метана) описывается следующими уравнениями реакций:



Химическая модель дает возможность сравнивать разные способы производства определенного продукта: доступность и стоимость сырья, возможность образования побочных продуктов или экологически опасных веществ как отходов производства. С ее помощью можно приближенно оценить затраты на приобретение сырья, реагентов и материалов, стоимость утилизации или обезвреживания отходов, предварительно определиться с энергетическими затратами, объемами капитальных вложений и т.п.

Например, фосфорная кислота может быть получена из фторапатита по трем вариантам: разложением сырья серной кислотой, азотной кислотой и электротермическим способом через восстановление фосфора (рис.7).

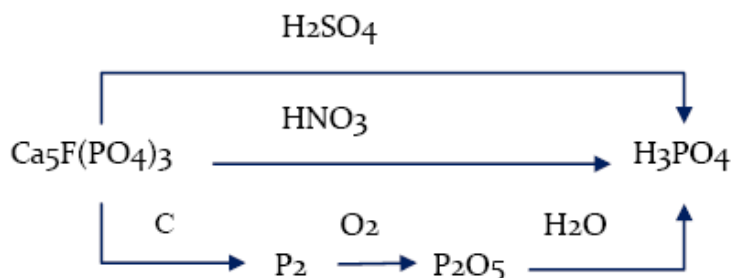
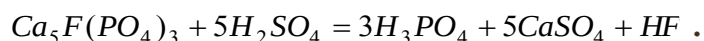


Рис. 7. Схемы получения фосфорной кислоты

Наиболее экономичным из трех вариантов является способ сернокислотного разложения, в основе которого лежит химическая реакция:



На основании выбранной химической схемы составляется функциональная схема ХТП (см. ниже).

Иконографические модели связаны с наглядным графическим изображением, чертежом. Обобщенные иконографические модели дают лишь качественное представление о функционировании системы. Это различные виды схем химико-технологического процесса, выполненные в виде чертежей. Существует несколько разновидностей таких схем:

— функциональная (принципиальная),

- структурная,
- операционная (операторная),
- технологическая.

Чтобы показать принцип составления различного вида схем, рассмотрим один узел производства — цех синтеза NH_3 .

Функциональная схема дает общее представление о процессе функционирования ХТС. Создается функциональная модель на начальных этапах синтеза ХТС, когда по известной химической модели и видам сырья предусматривают последовательность реализации основных и вспомогательных технологических операций.

На схеме выделяются основные узлы (подсистемы), выполняющие определенную технологическую операцию и указываются технологические связи между ними. По схеме можно определить, какие операции совершаются в производстве и в какой последовательности. Функциональная схема производства аммиака показана на рис. 8.

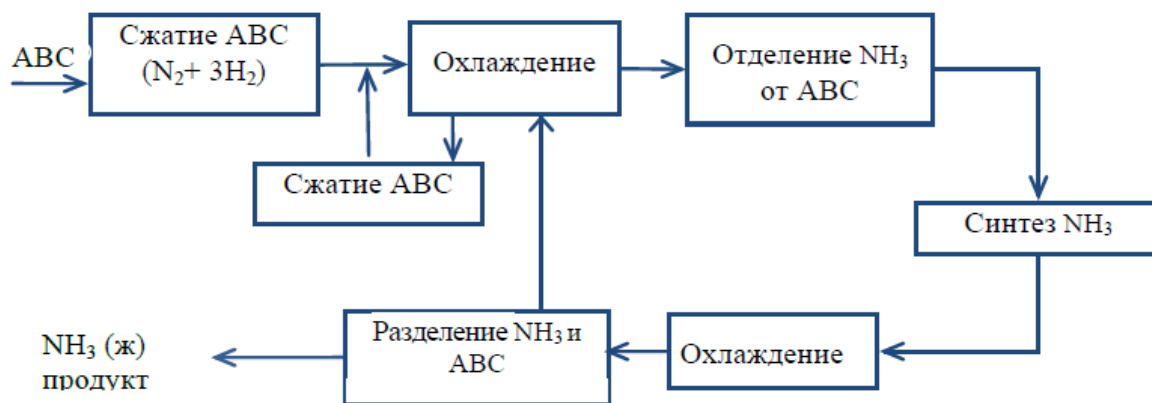


Рис. 8. Функциональная схема синтеза аммиака

Структурная схема ХТС дает изображение всех элементов ХТС в виде блоков, имеющих несколько входов и выходов, показывает технологические связи между блоками. Как и функциональная, структурная схема не содержит информации об отдельных типах элементов, но технологические связи в ней указывают направление движения материальных и энергетических потоков системы.

Наглядность связей позволяет легко составлять математическое описание, проследить связи между элементами.

Сравнительно с функциональной моделью структурная схема дает возможность определить количество основных элементов в ХТС или отдельных подсистемах. Однако эта схема, как и функциональная, не несет информации о типах конкретных элементов и о количественных параметрах их работы. Структурная схема синтеза аммиака показана на рис. 9.

Операторная схема в отличие от двух предыдущих дает наглядное представление о физико-химической сущности технологических процессов системы. Для этого каждый элемент ХТС изображают в виде определенного типового технологического оператора, который качественно или количественно преобразует физические параметры входных материальных и энергетических потоков.

Технологический оператор представляет собой совокупность элемента ХТС с соответствующей обвязкой (коммуникации, измерительная и регулирующая техника и т.п.) и типовый процесс, протекающий в нем.

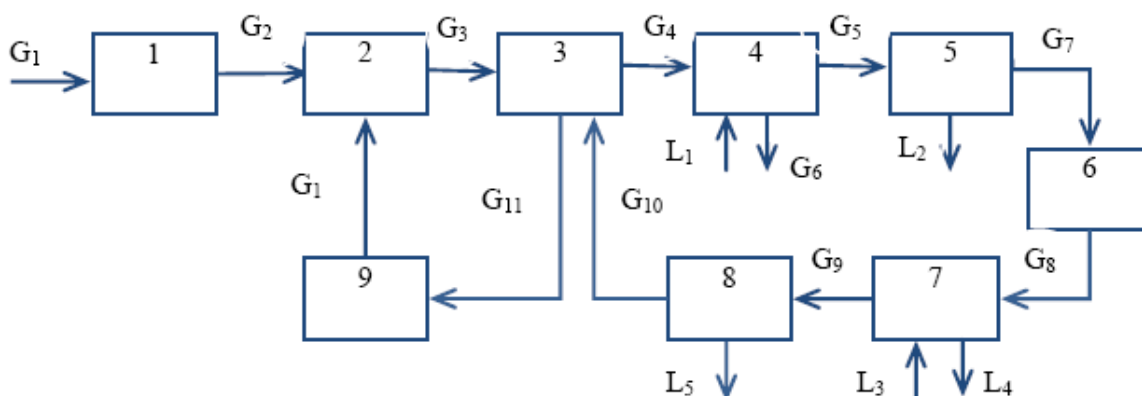


Рис. 9. Структурная схема синтеза аммиака

1-компрессор; 2 - инжектор; 3 - теплообменник; 4 - испаритель жидкого аммиака; 5,8 - сепараторы; 6 - колонна синтеза; 7- водяной холодильник; 9 - компрессор;

Материальные потоки: $G_1 - G_{12}$ - газа; $L_1 - L_5$ - жидкости

Технологические операторы обычно делят на основные и вспомогательные.

Основные технологические операторы (табл. 1) обеспечивают функционирование ХТС в требуемом целевом направлении. К ним относят технологические операторы химического превращения, межфазного массообмена, смешения и разделения.

Таблица 1

Обозначения основных и вспомогательных технологических операторов

Технологические операторы			
Основные		Вспомогательные	
	химического превращения		нагрева и охлаждения
	смешения		сжатия и расширения
	разделения		изменения агрегатного состояния
	межфазного массообмена		

Вспомогательные технологические операторы используют для повышения эффективности функционирования системы путем изменения ее энергетического и фазового состояний. К ним относят операторы нагрева и охлаждения, сжатия и расширения, изменения агрегатного состояния (конденсация, испарение, растворение).

В зависимости от типа ХТС каждый технологический оператор рассматривают либо как совокупность нескольких типовых операторов, либо как один типовой технологический оператор. Например, ректификационную колонну можно представить либо как технологический оператор разделения, либо как совокупность операторов межфазного обмена. Операторная схема производства аммиака приведена на рис. 10.

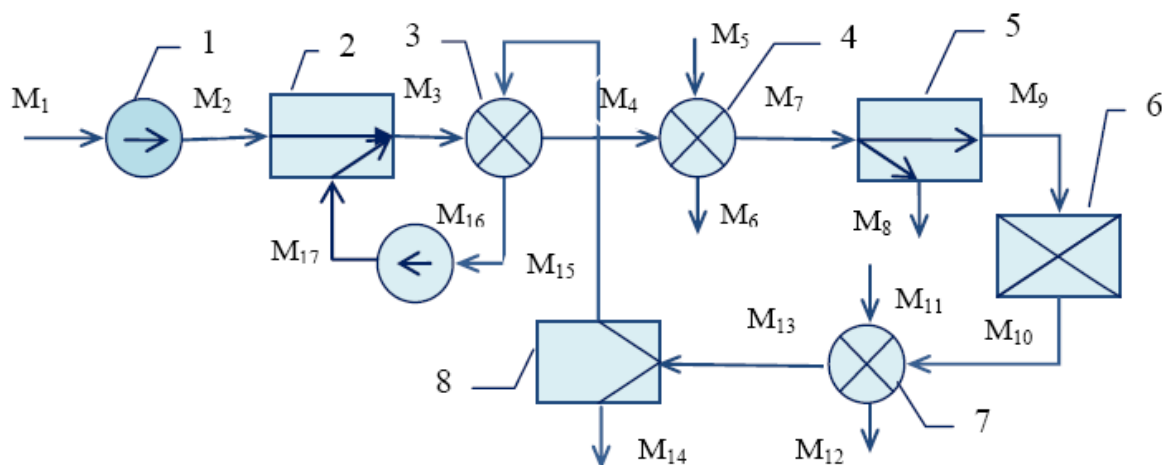


Рис. 10. Операторная схема синтеза аммиака

1- компрессор; 2 - инжектор; 3 - теплообменник; 4 - испаритель аммиака; 5,8 - сепараторы; 6 - колонна синтеза; 7- водяной холодильник; 9 - циркуляционный компрессор;
M₁ - M₁₇ - физические потоки

В операторе 1 происходит сжатие подаваемого потока сырья (азото-водородной смеси), в операторе 2 — его смешение с потоком непрореагировавшего сырья, уже побывавшего в реакторе, в операторах 3 и 4 — охлаждение азото-водородной смеси, в операторе 5 — выделение сконденсированного аммиака из азото-водородной смеси; в операторе 6 — химическое превращение, 7 — охлаждение водой, 8 — отделение продукта — NH₃ — от потока непрореагировавшего сырья, 9 — сжатие азото-водородной смеси.

Наиболее полное качественное представление о процессе дает *технологическая схема*. Каждый элемент процесса (аппарат, машина и т.д.) показан на ней в виде условного общепринятого стандартного изображения, технологические связи показаны направленными линиями со стрелками. По схеме можно судить о типах и способе соединения элементов (аппаратов и машин), о последовательности отдельных технологических процессов. Часто расположение аппаратов соответствует их примерной расстановке в цехе. Упрощенная технологическая схема производства аммиака приведена на рис. 11.

Технологическую схему получают в результате научной разработки данного способа производства, технологической и конструктивной проработки схем, узлов и аппаратов. Технологическую схему можно использовать для изображения ХТС как на стадии эксплуатации, так и на стадии проектирования.

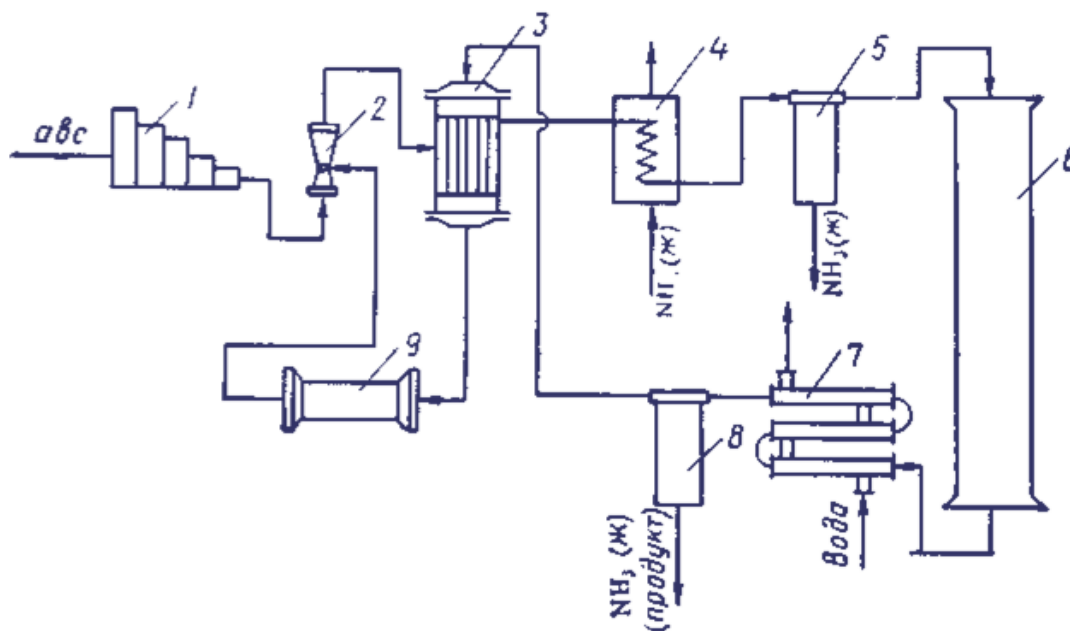


Рис. 11. Технологическая схема синтеза аммиака

1- компрессор; 2 - инжектор; 3 - теплообменник; 4 - испаритель аммиака; 5,8 - сепараторы; 6 - колонна синтеза; 7- водяной холодильник, 9 - циркуляционный компрессор

Математические модели. Математические модели дают количественное описание процесса. Они также могут быть представлены в нескольких разновидностях. Все математические модели можно разделить на символические и иконографические (см. рис.6).

Символическая (аналитическая) модель — это совокупность математических соотношений — формул, уравнений, неравенств. Эти соотношения позволяют определить физические параметры состояния технологических потоков на выходе системы в зависимости от факторов, воздействующих на систему - параметров входных технологических потоков (**X**), параметров окружающей среды (**O**), технологических (**D**) и конструкционных (**K**) параметров элементов системы:

$$Y = f(X, O, D, K) \quad (6)$$

Математическая символическая модель системы в целом включает совокупность символических моделей элементов и уравнения технологических связей между элементами.

Используют два метода составления математического описания ХТС. Один метод основан на глубоком изучении физико-химической сущности технологических процессов в ХТС и ее элементах, другой — на применении формально-эмпирических математических зависимостей, полученных в результате статистического обследования действующей ХТС.

Символические математические модели 2-го типа обычно называют статистическими. Они имеют вид регрессионных или корреляционных соотношений в зависимости от выбора выходных (функций цели) и входных факторов (параметров). Статистические модели могут быть получены методами пассивного (обработка имеющихся статистических данных) и активного (направленного и выборочного) эксперимента.

Символические математические модели, полученные в результате использования первого метода, получили название динамических или кинетических.

Иконографические математические модели — это графическое отображение количественной связи между переменными ХТС (например, графическая зависимость скорости химической реакции от концентрации реагентов).

Математические иконографические модели подразделяют на три группы: топологические модели, структурные блок-схемы и сетевые модели.

Топологические модели представляют в виде графов.

Граф — это фигура или конфигурация, образованная совокупностью некоторых точек (вершин или узлов); некоторые из них могут быть соединены отрезками прямых, ломаных или кривых линий. Линии могут иметь направление (тогда они называются дугами) или не иметь его (ребра). Для химико-технологического процесса часто вершинами графа являются его элементы, а дуги показывают связь между элементами.

Граф составляют в зависимости от того, какие элементы системы представляют интерес.

Предположим, что необходимо знать характеристику общих материальных потоков между элементами, представленными на операторной схеме (см. рис.10). Соответствующий материальный потоковый граф показан на рис. 12.

Поскольку нужно знать изменение общего массового расхода компонентов в системе, для построения графа из операторной схемы берут только те элементы, где меняется величина массового потока. Это и будут вершины графа.

В операторах 1, 3, 4, 6, 7, 9 (см. рис. 10) не изменяются общие массовые расходы (в операторах 1, 9 происходит изменение давления, в операторах 3, 4, 6, 7 — температуры; в операторе 6 идет химическое превращение, меняются состав и температура потока, но общий массовый расход остается неизменным). Поэтому на графе отсутствуют вершины, соответствующие перечисленным операторам. Но на нем должны быть отражены факты подачи сырья в систему и вывода продукта. Поэтому граф дополняется вершинами i , соответствующими источникам вещества, и вершинами S , отображающими сток вещества. Источник i соответствует общему количеству сырья, подаваемого в систему с потоком M_1 . Сток S_1 соответствует количеству продукта, выводимого из системы с потоком M_{14} ; S_2 — количеству NH_3 , выводимому с потоком M_8 .

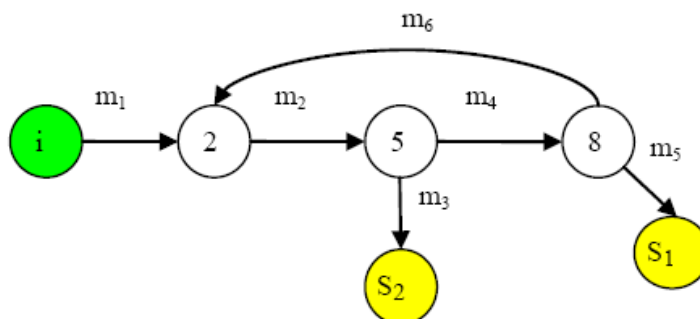


Рис. 12. Материальный потоковый граф

2, 5, 8 - вершины, соответствующие номерам операторов на операторной схеме (см. рис. 9); i - источник сырья, поступающего с материальным потоком M_1 ;

m_1 - m_6 - массовые потоки по общему расходу вещества;

S_1 и S_2 - стоки веществ с потоками M_{14} и M_8

Структурная блок-схема. На структурной блок-схеме каждый технологический оператор изображают в виде блока, подобного представленному на рис. 13.



Рис. 13. Блок структурной блок-схемы
 X и Y – векторы параметров состояния входного и выходного потоков; $[K]$ – набор коэффициентов передачи в виде матрицы.

Каждый блок представляет математическую модель технологического оператора (набор коэффициентов передачи и передаточных функций) и связывает вектор параметров, являющихся входными для данного блока, с вектором выходных параметров. Блок-схема всей ХТС представляет совокупность таких отдельных блоков, а связь между блоками осуществляется векторами параметров состояния соответствующих технологических потоков системы.

Сетевые модели — это иконографические модели, отображающие порядок выполнения работ по проектированию, эксплуатации и управлению ХТС.

1.7. Типы технологических связей

Аппараты ХТС соединены между собой технологическими связями. Различают следующие типовые соединения аппаратов: последовательное, параллельное, обводное (байпасное), рециркуляционное.

Последовательное соединение характеризуется тем, что весь технологический поток, выходящий из предыдущего аппарата, поступает полностью в последующий аппарат, т.е. выходящий из данного аппарата поток является входящим для последующего аппарата (рис. 14). При этом технологический поток проходит через каждый аппарат только один раз, т.е. не возвращается в него.



Рис. 14. Последовательная технологическая связь

При **параллельном соединении** технологический поток разделяется на несколько более мелких потоков, поступающих в различные аппараты системы (рис. 15). Выходящие из этих аппаратов потоки могут объединяться в один поток, а могут выходить из системы раздельно. Через каждый аппарат поток проходит один раз. Параллельное соединение аппаратов позволяет увеличить производительность по сырью при сохранении неизменной степени превращения.

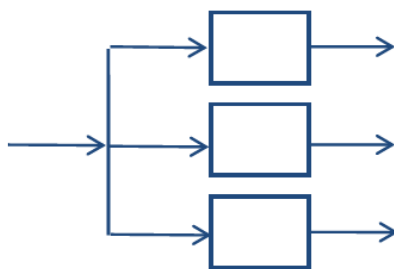


Рис. 15. Параллельная технологическая связь

При одновременном получении на базе одного исходного вещества двух или нескольких промежуточных продуктов, идущих на производство одного целевого продукта, также удобно параллельное соединение.

Параллельное соединение применяют и тогда, когда необходимо увеличить надёжность производства и обеспечить возможность его работы с минимальной производительностью. В случае необходимости параллельные линии могут быть отключены по экономическим соображениям или для ремонта.

При **обводном или байпасном соединении** через ряд последовательно соединённых аппаратов проходит только часть потока, другая часть обходит один или несколько аппаратов, а затем соединяется с основной частью потока (рис. 16).

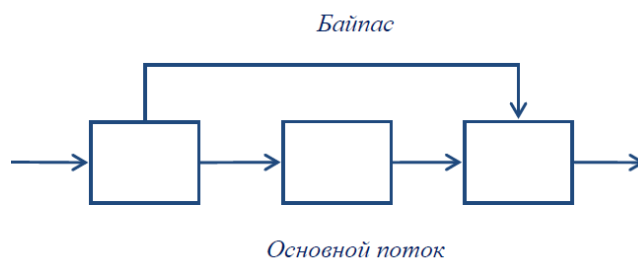


Рис. 16. Обводная технологическая связь (байпас)

При байпасном соединении направления главного и побочного потоков совпадают, каждый проходит через какой-либо аппарат только один раз.

Байпас широко используют для создания оптимального температурного режима при проведении обратимых экзотермических реакций. Температуру процесса регулируют смешением главного горячего потока с холодным байпасным потоком.

При байпасном соединении вследствие уменьшения потока, идущего через реактор, увеличивается время пребывания в реакторе и, следовательно, степень превращения сырья в продукты.

Рециркуляционное соединение (рецикл) характеризуется наличием обратного технологического потока в системе последовательно соединённых аппаратов. Обратный поток связывает выход одного из последующих аппаратов с входом одного из предыдущих (рис. 17). Обратный поток может огибать как один аппарат, так и несколько. Схемы с рециклом относятся к замкнутым схемам.

Типичным примером такого процесса служит синтез аммиака.

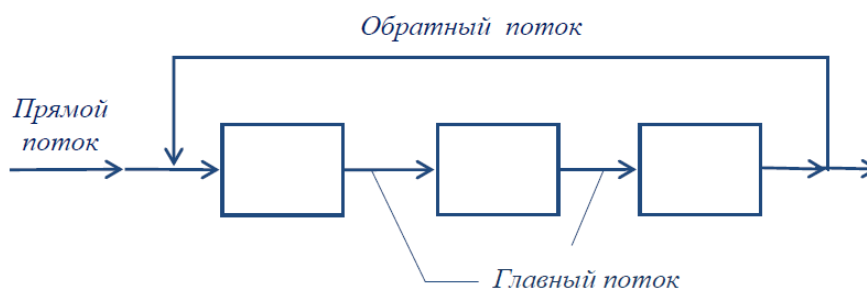


Рис. 17. Рециркуляционная технологическая связь

Для соединения с рециклом масса главного потока равна сумме масс обратного и прямого потоков:

$$m_{\text{гл}} = m_{\text{об}} + m_{\text{прям}} \quad (7)$$

Работа схемы с рециклом характеризуется степенью рециркуляции R и коэффициентом рециркуляции r .

R показывает, какая доля главного потока после его разветвления возвращается в процесс:

$$R = \frac{\text{обратный поток}}{\text{главный поток}} = \frac{m_{\text{об}}}{m_{\text{гл}}} \quad (8)$$

r показывает, во сколько раз главный поток больше прямого

$$R = \frac{\text{главный поток}}{\text{прямой поток}} = \frac{m_{\text{гл}}}{m_{\text{прям}}} \quad (9)$$

$$R = 1 - \frac{1}{r} \quad \text{и} \quad r = \frac{1}{1 - R} \quad (10)$$

Рециркуляцию применяют во многих современных химических процессах, поскольку она позволяет осуществлять более полное превращение сырья, сводить к минимуму выход побочных продуктов, проводить реакции с большой скоростью.

1.8. Свойства ХТС как системы

ХТС как и любая система функционирует как единое целое, представляя совокупность взаимосвязанных элементов. Объединение элементов в систему создаёт два фундаментальных следствия: *интерэктность* и *эмерджентность*.

1). **Интерэктность ХТС** - это способность элементов, образующих систему, взаимодействовать между собой в процессе функционирования системы.

Взаимодействие между элементами ХТС происходит благодаря технологическим связям между элементами.

В результате интерэктности для ХТС изменение параметров входных потоков одного элемента (или изменение параметров технологического режима внутри этого элемента) приводит к изменению параметров выходных потоков других элементов.

Например, для химического реактора существует взаимодействие (взаимовлияние) состава входного потока и температуры выходного потока, для абсорбционного аппарата— взаимодействие расхода входного потока и давления выходного потока и т.д.

Изменение состояния выходящих из предыдущего элемента потоков и входящих в последующий, приводит к изменению условий работы последнего, что двояко сказывается на режиме работы в нем, отражаясь на эксплуатационных свойствах аппарата и на изменении эффективности процесса.

Рассмотрим получение аммиака из азото-водородной смеси (АВС), функциональную схему которого см. на рисунке 8. Очистка АВС от остатков оксида углерода осуществляется в реакторе метанирования по реакции $CO + H_2 = CH_4 + H_2O$. Допустим, по какой-либо причине уменьшилась степень гидрирования CO . Соответственно, АВС, поступающая в отделение синтеза аммиака, будет содержать больше CO и меньше CH_4 . Синтез аммиака осуществляется в системе с рециклом, поэтому уменьшение инертного компонента CH_4 в исходной смеси приведет к снижению его накопления в цикле синтеза и, следовательно, к увеличению парциального давления азота и водорода. Последнее увеличит скорость реакции и, соответственно, степень превращения АВС в продукт. Эффект благоприятный и проявляется сразу же после такого изменения в метанировании. Но с другой стороны, CO -яд для катализатора синтеза аммиака. С увеличением содержания CO дезактивация катализатора будет происходить быстрее, что приведет к ухудшению эффективности процесса во времени, по мере отравления катализатора.

Режим аппарата может зависеть не только от предыдущего, но и последующего элемента. Это возможно не только при наличии рецикла. Обратное воздействие может иметь физическую причину. В основном это связано с изменением давления, которое распространяется во всех направлениях, в том числе и в противоположном движению потока. Если гидравлическое сопротивление какого-либо узла возрастает, то давление на входе в этот узел увеличивается (при поддержании постоянным расхода потока через него) и, следовательно, повышается в предыдущем аппарате. Может возникнуть аварийная ситуация. Например: в одном месте системы, работающей при высоком давлении, произошел резкий сбой давления. В находящемся перед этим узлом аппарате- реакторе - находится зернистый слой катализатора, гидравлическое сопротивление которого не позволило газу также быстро пройти через реактор, и на какое-то время перепад в слое резко увеличивается. Опорные решетки для катализатора обычно рассчитаны на его вес и перепад давлений при нормальной работе. Резкое уменьшение давления после реактора в описанной ситуации вызывает многократное, хотя и кратковременное, увеличение нагрузки на опорную решетку, что может привести к ее разрушению.

Таким образом, необходимость учета условий работы элементов в системе как в «штатном» режиме (при задаваемых условиях эксплуатации), так и в изменяющихся условиях эксплуатации является очевидной.

Взаимозависимость режимов ХТС может иметь и *положительный эффект*: усовершенствование одного узла (элемента) улучшает эффективность ХТС в целом за счет выигрыша в другом узле системы. Предположим, в реакторе произошла замена старого катализатора на новый, более селективный по отношению к целевому продукту. Однако, на общем выходе целевого продукта это скажется мало, т.к. количество побочных продуктов реакции незначительно. Кроме того, новый, более дорогой катализатор требует дополнительных затрат в реакционном узле. Но так как в системе очистки основные затраты приходятся на удаление именно малого количества примесей, их уменьшение приведет к существенному уменьшению затрат на очистку и, в конечном итоге, уменьшению затрат в системе в целом.

2). Эмерджентность - несводимость свойств системы к сумме свойств её компонентов.

Так как каждый ХТП имеет собственную рабочую характеристику, определяющуюся сложностью элемента, то объединение элементов в ХТС будет сопровождаться взаимным наложением рабочих характеристик элементов. Ситуация будет усугубляться при усложнении технологических связей между элементами. Таким образом, благодаря объединению элементов в систему, она приобретает новые качества, которыми не обладают элементы в отдельности.

Для химических процессов особое значение имеет соотношение микро- и макрокинетики, т.е. взаимовлияние режима на характер протекания технологического процесса с одной стороны и природы процесса на необходимость выбора режима - с другой. Однако некоторые свойства элементов могут быть утрачены (или стать неактуальными) при образовании системы.

Взаимосвязь элементов ХТС (как и любых систем) и их разная природа приводит к тому, что система принципиально несводима ни к одной, даже самой важной своей подсистеме и, тем более - к элементу. Образно говоря, система больше суммы своих частей на совокупность связей между ними.

Важнейшее следствие этого заключается в том, что *и устойчивые состояния, и оптимальные характеристики системы не совпадают с оптимальными характеристиками ни одной подсистемы.*

Практически это означает, что оптимизацией отдельных элементов и подсистем оптимизировать систему в целом невозможно.

Например, рабочие характеристики аппаратов, образующих ХТС, имеют монотонный характер, а рабочая характеристика ХТС имеет экстремум (рис.18).

Таким образом, расчет и оптимизация технологических режимов отдельных ХТП и аппаратов без учета их взаимосвязей с остальными, входящими в ХТС данного производства, могут привести к неоптимальным значениям параметров технологических режимов и показателей эффективности функционирования всего производства, т.е. ХТС в целом.

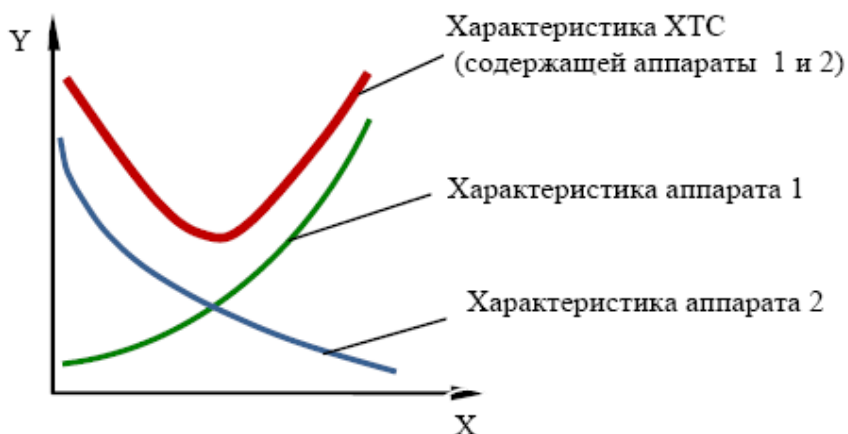


Рис. 18. Рабочие характеристики ХТС и отдельных элементов

3). Устойчивость и чувствительность (к возмущениям и управлению).

Устойчивость ХТС – способность ХТС возвращаться в исходное стационарное состояние после устранения возмущений, вызвавших выход системы из этого состояния. Очевидно, что системы должны быть максимально устойчивы к действию возмущений.

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

Обратные связи, имеющиеся в системе, могут привести к появлению неоднозначности режимов и неустойчивости некоторых из них.

Рассмотрим распространенную для химических процессов систему - реактор с внешним теплообменником (рис. 19).

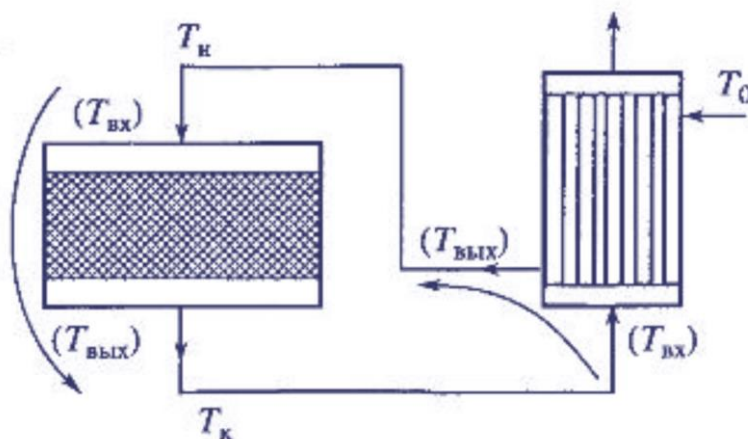


Рис. 19. Схема реактора с выносным теплообменником

T_n - температура на входе в реактор; T_k - температура на выходе из реактора; T_0 - температура на входе в теплообменник. Стрелками показана обратная связь по теплу между входящим и выходящим потоками с температурами $T_{вх}$ и $T_{вых}$ соответственно.

Исходная реакционная смесь с температурой T_0 поступает в теплообменник, нагревается в нем и поступает в реактор с температурой T_n . Выходящий из реактора более горячий поток (если процесс в реакторе экзотермический) с температурой T_k охлаждается за счет отдачи своей теплоты исходной реакционной смеси. В этой системе очевидна обратная связь по теплу между входящим и выходящим потоками.

Пусть по каким-либо внешним причинам температура на выходе из реактора T_k повысилась. Несмотря на то, что источник возмущения кратковременный, и условия процесса быстро восстанавливаются, увеличение T_k приведет к дополнительному нагреву исходной реакционной смеси в теплообменнике, и температура на входе в реактор T_n увеличится. Последнее приведет к увеличению скорости реакции, тепловыделению в реакторе и дальнейшему возрастанию T_k , что еще больше увеличит нагрев исходной смеси. Такая круговая последовательность взаимного нагрева входного и выходного потоков может продолжаться далее со значительным нарастанием температуры, даже если источник первоначального возмущения будет убран.

Если же возмущение режима привело к уменьшению температуры T_k , то аналогичным образом будет происходить охлаждение системы. Описанная круговая последовательность взаимного нагрева (или охлаждения) обусловлена обратной связью входящего и выходящего потоков, т.е. обусловлена внутренней структурой схемы, и является ее свойством.

Чем сильнее реагирует процесс в реакторе на начальную температуру (чем больше чувствительность системы), тем больше вероятность невыполнения условия устойчивости. Чтобы оно выполнялось, необходимо уменьшать интенсивность обратной связи входящего и выходящего потоков, т.е. добиться того, чтобы меньшее количество теплоты было передано через теплообменник.

Неустойчивые режимы могут возникнуть в нелинейных системах с обратными связями.

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

Для того, чтобы быть управляемой, система должна быть *оптимально чувствительной* к управляющим воздействиям: в случае низкой чувствительности управление станет невозможным. В случае слишком высокой чувствительности система станет неустойчивой по отношению к возмущениям управляющих воздействий.

5). Надежность ХТС – свойство сохранять работоспособность в течение заданного времени функционирования, сохраняя во времени значения установленных эксплуатационных показателей (технологические параметры процессов, производительность, качество продукции, расходы материальных ресурсов и др.). Любое нарушение этих функций приводит к потенциальной возможности аварий и получению некондиционной продукции, что особенно опасно для крупнотоннажных производств.

Данная задача решается на этапе проектирования таким образом, чтобы даже при выходе из строя некоторой части вспомогательного оборудования или части системы управления, система сохраняла свою работоспособность.

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

Количественно надёжность выражают вероятностью наступления отказа в системе в заданный промежуток времени. Чем ниже вероятность отказа элементов и подсистем и чем ниже вероятность отказа системы в случае наступления отказа элементов, тем система надёжнее.

Например, если имеется система, состоящая из последовательных подсистем А, В, С, то вероятность отказа системы Р через заданный промежуток времени можно оценить через вероятность отказа каждой подсистемы P_A , P_B , P_C (вероятность того, что отказа не произойдет, равна $1 - P$). Вероятность того, что не откажет вся система, равна произведению отдельных вероятностей:

$$(1 - P) = (1 - P_A)(1 - P_B)(1 - P_C) \quad (11)$$

Например, если $P_A = 0,02$, $P_B = 0,05$, а $P_C = 0,20$ то $1 - P = 0,98 \cdot 0,95 \cdot 0,80 = 0,74$

Вероятность того, что откажет вся система, равна $P = 1 - 0,74 = 0,26$, т.е. 26%.

2. АНАЛИЗ ХТС

Анализ как познавательная операция - это мысленное, а также часто и реальное расчленение (разложение, или декомпозиция) некоторого объекта (предмета, явления или процесса), свойства предметов или отношений (взаимосвязей) между предметами на некоторые части (элементы) - признаки, характеристики, факторы.

Анализ ХТС как инженерно-техническая операция - исследование структуры и свойств ХТС.

Анализ всегда является составной частью, этапом синтеза ХТС. Однако, он является важнейшей самостоятельной задачей в случае необходимости усовершенствовать уже существующую ХТС.

Анализ ХТС осуществляется при разработке и проектировании нового химического производства, при эксплуатации действующего производства, для сравнения различных вариантов реализации процесса или при модернизации и реконструкции производства.

Цель анализа ХТС - получение объективных, количественно соответствующих экспериментальным данным или опыту работы сведений о:

- 1) состоянии ХТС;
- 2) показателях эффективности ее функционирования - технологических, экономических, социальных, эксплуатационных;
- 3) влиянии химической схемы, структуры технологических связей, свойств и состояния элементов и подсистем, условий эксплуатации на эти данные.

2.1. Задачи анализа ХТС

Задачи анализа ХТС можно подразделить на *анализ структуры и анализ качества функционирования ХТС*.

Цель анализа структуры ХТС заключается в выявлении её структурных особенностей и нахождение оптимальной последовательности расчёта её элементов.

Логическое расчленение ХТС с целью исследования свойств и оптимизации целесообразно проводить в следующей последовательности.

Структурный (топологический) анализ

1) Определение подсистем. Декомпозиция (разделение) ХТС на подсистемы и элементы.

2) Определение главных и сильно связанных элементов в подсистемах ХТС. Например, реакторы, основные аппараты, машины, системы защиты.

3) Определение вспомогательных и слабо связанных элементов в подсистемах ХТС. Например, ёмкости и хранилища сырья, материалов и отходов, редко используемые элементы. Декомпозиция ХТС по слабым связям.

4) Определение главных и значимых потоков и переменных ХТС.

Цель анализа качества функционирования ХТС – получение количественных оценок её основных свойств: технологических показателей, к которым относятся эффективность использования сырья и энергии, экономических показателей, некоторых социальных показателей.

Функциональный анализ элементов ХТС

5) Составление материальных и тепловых балансов для подсистем и элементов ХТС.

6) Математическое моделирование элементов и подсистем ХТС. Составление математического описания статики и динамики элементов и подсистем ХТС и разработка методов и алгоритмов решения задач.

7) Проверка адекватности моделей (включая физическое моделирование и натурный эксперимент).

Структурный и функциональный анализ ХТС

8) Анализ структуры ХТС.

9) Расчёт системы в целом. Определение параметров потоков ХТС заданной структуры и заданного состояния её элементов на основе расчётов материальных и тепловых балансов.

10) Исследование свойств ХТС. Определение оптимальных технологических параметров: температуры, давления, расхода и концентрации реагентов, соотношений между ними и т.п. Определение технических показателей: выход продуктов, селективность, степень превращения сырья, количество отходов и т.п.

11) Оценка эффективности данной ХТС на основе технико-экономического анализа ХТС:

— определение экономических критериев оценки эффективности системы: расходные коэффициенты по сырью и энергии, затраты на изготовление продукции, капитальные затраты и т.п.,

— определение себестоимости продукции на основании вышеперечисленных критериев.

12) Анализ условий функционирования системы - ее устойчивость и надежность, безопасность, наличие побочных продуктов и отходов, условия работы, уровень механизации и автоматизации процессов и т.п.

13) Оценка эффективности использования ресурсов.

14) Выявление резервов и путей повышения эффективности ХТС.

Далее рассмотрим количественную оценку основных технологических показателей - эффективности использования материальных и энергетических ресурсов.

2.2. Эффективность использования материальных ресурсов

Основным показателем использования сырья (а также энергии, вспомогательных материалов) является **расходный коэффициент**, показывающий количество затраченного сырья (энергии, вспомогательных материалов) на производство единицы продукта. Различают *теоретический расходный коэффициент*, определяемый из стехиометрического уравнения химической реакции при полном превращении исходных веществ, и *практический* (или *расходный коэффициент*), т.е. реально достигнутый в производстве. Их отношение показывает степень использования сырья.

$$\text{Расходный коэффициент} = \frac{\text{Количество затраченного сырья}}{\text{Количество продукта}}$$

$$\text{Степень использования сырья} = \frac{\text{Теоретический расходный коэффициент}}{\text{Расходный коэффициент}}.$$

Основные причины различий между теоретическими и реальными расходными коэффициентами:

— неполнота превращения исходного вещества в продукт (термодинамические причины: состояние равновесия обратимых реакций не позволяет проводить до конца основную реакцию); кинетические (не достигается теоретически возможная степень превращения из-за низких скоростей реакции);

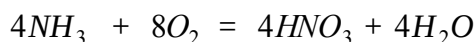
— образование побочных веществ;

— потери промежуточных компонентов и продукта;

— наличие в сырье примесей;

— использование части сырья на вспомогательные цели.

Например, суммарное стехиометрическое уравнение последовательного получения HNO_3 из аммиака описывается уравнением



Теоретически для получения одной тонны 100% - ной HNO_3 необходимо взять

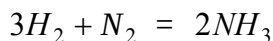
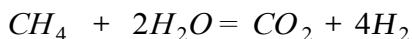
$$1000 \cdot \frac{17}{63} = 269,8 \text{ кг } \text{NH}_3$$

Это – теоретический расходный коэффициент. С учетом степени превращения NH_3 до NO равной 0,94 и дальнейших потерь, составляющих около 0,5%, реальный расходный коэффициент составит

$$\frac{269,8}{0,94 \cdot (1 - 0,005)} = 288,4 \text{ кг } NH_3 .$$

Степень использования сырья (аммиака) при этом равна $269,8 / 288,4 = 93,6\%$.

Другой пример. Производство аммиака из природного газа можно представить химической схемой:



Теоретически на производство 1т NH_3 необходимо затратить 494 м^3 природного газа (метана). Реальный расходный коэффициент составляет более $1000 \text{ м}^3/\text{т } NH_3$. Дополнительный расход обусловлен следующими причинами:

- использованием метана (сжигание) для обеспечения температурного режима эндотермического процесса;
- использованием части образовавшегося водорода на очистку природного газа от серосодержащих примесей и азото-водородной смеси от CO , а также деструкцию высших углеводородов в природном газе до CH_4 ;
- неполной конверсией метана из-за обратимости реакции.

Значения расходных коэффициентов сырья и других расходуемых компонентов (энергии всех видов, вспомогательных материалов) входят в техническую (проектную и отчетную) документацию по производству.

2.3. Энергетическая и эксергетическая эффективность ХТС

2.3.1. Тепловой коэффициент полезного действия

Источниками снабжения энергией ХТС являются входящие потоки, несущие энергию топлива $Q_{\text{топл}}$, электроэнергию $Q_{\text{эл}}$, теплоту сырья $Q_{\text{сыр}}$ и вспомогательных материалов $Q_{\text{мат}}$, а также экзотермические реакции $Q_{\text{экз}}$. Их суммарное количество (или затраты энергии) обозначаются $Q_{\text{затр}}$. Энергия выводится из системы с потоками продуктов $Q_{\text{прод}}$, отходов производства $Q_{\text{отх}}$, с энергетическими потоками $Q_{\text{эн}}$, затрачивается на проведение эндотермических реакций $Q_{\text{энд}}$ и теряется естественным путем $Q_{\text{пот}}$. Состав энергетических потоков ХТС показан на рис. 20.

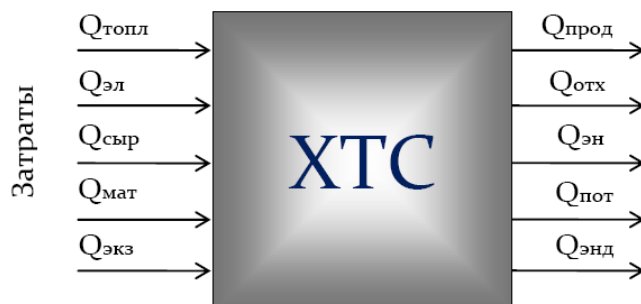


Рис. 20. Состав энергетических потоков ХТС

Входящие энергетические потоки: $Q_{\text{топл}}$ - энергия топлива; $Q_{\text{эл}}$ - электроэнергия; $Q_{\text{сыр}}$ - теплота сырья; $Q_{\text{мат}}$ - теплота вспомогательных материалов; $Q_{\text{экз}}$ - теплота экзотермических реакций.

Выходящие энергетические потоки: $Q_{\text{прод}}$ - энергия продуктов; $Q_{\text{отх}}$ - энергия отходов производства; $Q_{\text{эн}}$ - энергия энергетических потоков; $Q_{\text{пот}}$ - потери энергии; $Q_{\text{энд}}$ - теплота эндотермических реакций.

Часть выходящих энергетических потоков $Q_{\text{эн}}$ полезно используется в виде пара котлов-утилизаторов, получаемого при нагревании внешних потоков (например, воды), энергии турбин и электрогенераторов (т.е. превращается в работу). В таком представлении энергетическую эффективность ХТС характеризуют **тепловым коэффициентом полезного действия** – тепловым КПД:

$$\eta_{\text{тепл}} = Q_{\text{эн}} / Q_{\text{затр}} \quad (12)$$

Тепловой КПД, как правило, имеет невысокое значение и обычно не превышает 70%. До 30 % теплоты (а иногда и больше) выносятся с отходящими продуктами и до 15% составляют потери через стенки реактора в окружающую среду.

Тепловые потери можно уменьшить тепловой изоляцией аппарата и выбором таких его габаритов, которые обеспечивают наименьшую поверхность теплоотдачи в окружающую среду. Следует заметить, что некоторые реакторы теплоизолировать нельзя из-за специфических условий работы. Например, вращающиеся барабанные печи для выжигания клинкера работают при температуре 1200...1400 °С, поэтому при отсутствии естественного охлаждения извне их корпус может деформироваться. Тепловые потери в окружающую среду этих аппаратов составляют около 25 %.

Вышеприведенное определение теплового КПД содержит внутренние противоречия. Во-первых, если энергетические потоки используются внутри системы, покрывая часть расходов, т.е. $Q_{\text{эн}} = 0$, то $\eta_{\text{тепл}} = 0$. Во-вторых, если энергетические потоки используются полностью для выработки энергии, то в этом случае $\eta_{\text{тепл}} < 100\%$. И то, и другое – не логично.

Более рационально коэффициент полезного действия может быть представлен отношением полезно затраченной теплоты к суммарному его количеству, введенному в химико-технологическую систему:

$$\eta_{\text{тепл}} = \frac{Q_n + \alpha Q_{\text{вэр}}}{BQ_T + Q_{\text{экз}} + Q_n} \quad (13)$$

где Q_n – теплота, полезно затраченная на технологические цели и определяемая из условий теоретического расхода для осуществления физических и химических процессов, имеющих место в элементах ХТС; α – доли теплоты вторичных энергоресурсов, генерированных в элементах ХТС (котлах-утилизаторах) и расходуемых вне и внутри системы; $Q_{\text{вэр}}$ – теплота вторичных энергоресурсов, генерированная в энергетическом элементе ХТС; B – расход топлива на технологические цели ХТС; Q_T – теплота сгорания топлива; $Q_{\text{экз}}$ – теплота, образуемая при химических и физических превращениях в ХТС; Q_n – теплота, подведенная в ХТС с энергоносителями (водяной пар, горячая вода и др.).

Такое выражение КПД более логично, но, тем не менее, и оно не лишено недостатков. Продукт обладает каким-то потенциалом, который используется в дальнейшем при потреблении этого продукта. В выражении (13) потенциал продукта определяется не только затратами на его образование Q_n . Если продукт образуется в результате протекания экзотермической реакции, то затраты на него будут меньше, и η уменьшается независимо от

потребительской ценности продукта. В результате, термический КПД всегда ниже для экзотермической реакции, чем для эндотермической.

2.3.2. Коэффициент полезного действия полной энергии

Для определения теплового потенциала любого потока относительно окружающей среды используется другой подход, основанный не только на тепловой характеристике потока, но и химической его составляющей – химической энергии потока $I_{хим}$. Таким образом, выражение для *полной энергии* I будет выглядеть следующим образом:

$$I = I_q + I_{хим} \quad (14)$$

К параметрам окружающей среды, относительно которых определяется I , относятся химический потенциал веществ, устойчивых в ней и ее температура T_0 . Потенциал потока относительно такого состояния и определяет его полную энергию. Давление в данном случае не учитывается, из-за не изолированности ХТС от окружающей среды.

Тепловая энергия потока I_q (удельная – i_q) есть теплота нагрева вещества от T_0 до температуры T состояния потока. Расчет удельной тепловой энергии i_q в общем случае имеет вид:

$$i_q = \int_{T_0}^{T_{пл}} c_{p,мв} dT + \Delta H_{пл} + \int_{T_{пл}}^{T_{кип}} c_{p,жс} dT + \Delta H_{кип} + \int_{T_{кип}}^T c_{p,г} dT \quad (15)$$

В этом уравнении учтены все фазовые переходы, которые могут иметь место в потоке в результате нагрева вещества – плавление и испарение (кипение). Если в интервале ($T_0 - T$) существование каких-то фаз невозможно, то соответствующие слагаемое в уравнении (15) исключается.

Химическая энергия потока $I_{хим}$ (удельная – $i_{хим}$) есть энергия образования компонентов технологических потоков из энергетически полностью обесцененных соединений окружающей среды, называемых веществами отсчета. Например, в атмосфере такими веществами являются N_2 , O_2 , Ar ; в гидросфере – H_2O и почти все элементы в виде растворимых солей; в литосфере – слаборастворимые высшие окислы (песок, кварциты и др.).

Химическая энергия вычисляется из энтальпии образования компонентов потока $\Delta H_{обр}$ и веществ отсчета $\Delta H_{обр}^{см}$, с учетом растворения вещества отсчета в соответствующей среде ΔH_p с образованием бесконечно разбавленного раствора:

$$i_{хим} = \Delta H_{обр} - \Delta H_{обр}^{см} + \Delta H_p \quad (16)$$

Химическую энергию потока можно определить как энергию девальвации веществ в энергетически обесцененные соединения, что соответствует выражениям (14) – (16). В них разумно учитывается потенциал любого потока, которым он обладает над принятым состоянием окружающей среды, или энергия (теплота), которую поток может отдать, перейдя в состояние окружающей среды.

Эффективность процесса по полной энергии потоков в нем – **коэффициент полезного действия (КПД) полной энергии** $\eta_{эн}$ – определяется как отношение сумм полной энергии полезных потоков $\sum I_{пол}$ и потоков выходящих из системы $\sum I_{затр}$:

$$\eta_{эн} = \sum I_{пол} / \sum I_{затр}, \quad (17)$$

где $\sum I_{затр} = \sum I_{вх} = \sum I_{вых}$ следует из энергетического баланса.

В табл.2 приведены значения химической и тепловой энергии выходящих потоков коксовой батареи.

Таблица 2

Значения химической и тепловой энергии выходящих потоков коксовой батареи

Выходящие потоки коксовой батареи	Химическая $I_{хим}$ и тепловая энергии I_q потоков, МВт·ч	
	$I_{хим}$	I_q
Кокс	11,05	0,62
Коксовый газ	4,51	0,02
Паро-водяная смесь после охлаждения коксового газа	0	0,54
Потери на тушение кокса	0	0,62
Потери коксового газа	0,42	0
Тепловые потери	0	0,3
Итого	18,08	

Полезно используемыми потоками являются кокс как продукт и коксовый газ, далее используемый для выработки энергии. Их полная энергия (полезная) $\sum I_{пол} = 16,2$ МВт·ч и $\eta_{эн} \approx 0,9$. Если учитывать только вырабатываемую энергию при сжигании коксового газа $Q_{эн} = 4,51 + 0,02 = 4,53$ МВт·ч, то получаемый тепловой КПД $\eta_t \approx 0,25$. Следовательно, оценка энергетической эффективности производства по $\eta_{эн}$ представляется более состоятельной.

2.3.3. Эксергетический коэффициент полезного действия

С точки зрения возможности практического применения ценность энергии определяется не только ее количеством, но прежде всего тем, насколько она в конкретных условиях может быть использована. Оценка полной энергии потока еще не указывает на возможность ее использования.

Сравним два выходящих из системы потока воды с одинаковой тепловой энергией (табл.3).

Несмотря на равенство теплоты рассмотренных потоков, их энергетическая ценность различна. Мера пригодности любого вида энергии для получения энергии в обратимом процессе взаимодействия с окружающей средой по предложению З. Ранга в 1956 г. была названа *эксергией*, т.е. эксергия фактически есть потенциал рабочего тела.

Эксергия E равняется величине наибольшей (максимально полезной) работы A_{max} , которую может выполнить энергоноситель (рабочее тело) в обратимом процессе перехода из неравновесного состояния в состояние равновесия с окружающей средой.

Поскольку эксергия характеризует работоспособность энергоносителя относительно окружающей среды, она дает возможность оценить качество энергии. Согласно определению *эксергия зависит не только от параметров системы, но и (в противоположность энергии) от параметров окружающей среды*. Возможны случаи, когда большую тепловую энергию системы нельзя полезно использовать, если окружающая среда имеет такую же температуру или такое же давление (даже высокое) как и система. В обоих случаях эксергия системы равняется нулю. И наоборот, чем выше температура или давление энергоносителя

относительно параметров окружающей среды, тем больше практическая пригодность энергии выполнять работу и превращаться в другие виды.

Таблица 3

Возможности использования потоков воды с одинаковой тепловой энергией

Поток воды	Объем, м ³	Температура T, °C	Тепловая энергия потока I _q , кДж (при T ₀ = 20°C)	Варианты использования
1 при атм. давлении	100	40	8,4·10 ²	- подогрев воды для ТЭЦ: неэкономично из-за малой движущей силы, т.к. потребует очень больших теплообменников; - обогрев помещений: температура потока не соответствует техническим условиям, разве только для обогрева теплиц
2 под давлением 3 атм	18	130	8,4·10 ²	- выработка технологического пара с высокой температурой и давлением 2 атм с последующим его применением для разнообразных целей

В расчете эксергии все источники энергии разделяют на энтропийные и неэнтропийные.

Неэнтропийные источники энергии (электрическая, магнитная, механическая) не имеют энтропии, а потому они полностью превращаются в любые другие виды энергии и такие превращения ограничиваются условиями первого закона термодинамики. Эксергия неэнтропийного источника равняется его энергии.

Энтропийные источники энергии (энергия излучения, внутренняя энергия вещества, энергия теплового потока, химическая энергия и т.п.) имеют энтропию, поэтому преобразование энергии из одной формы в другую происходят не полностью и сопровождаются энергетическими потерями. Изменению энтропии ΔS отвечает появление определенного количества "связанной" энергии, превращение которой в эксергию в условиях равновесия с окружающей средой принципиально невозможно.

Сравнение свойств энергии и эксергии системы представлено в табл. 4.

Для расчетов используют удельную эксергию e , которая включает химическую e_x и физическую e_ϕ составляющие:

$$e = e_x + e_\phi \quad (18)$$

Химическая эксергия рассчитывается через химическую энергию деэвалюации веществ рабочего тела и вещества отсчета (см. уравнение 16) и изменение при этом энтропии этого перехода.

Свойства энергии и эксергии системы

Энергия	Эксергия
Зависит от параметров системы и не зависит от параметров окружающей среды.	Зависит как от параметров системы, так и от параметров окружающей среды.
Всегда имеет величину, отличающуюся от нуля.	Может иметь величину, которая равна нулю (в состоянии равновесия с окружающей средой).
Подчиняется закону сохранения энергии в любых процессах и уничтожаться не может.	Подчиняется закону сохранения энергии только в обратимых (идеальных) процессах, в реальных необратимых процессах она может частично или полностью уничтожаться.
Переход одних форм энергии в другие ограничивается условиями второго закона термодинамики (в том числе и для обратимых процессов).	В обратимых процессах для трансформации эксергии не существует ограничений

Физическая эксергия рассчитывается по уравнению:

$$e_{\phi} = \Delta H - T_0 \Delta S \quad (19)$$

Изменение энтальпии ΔH происходит с изменением температуры:

$$\Delta H = \bar{c}_p (T - T_0), \quad (20)$$

а изменение энтропии - с изменением T и p :

$$dS = c_p \frac{dT}{T} - R \frac{dp}{p},$$

$$\Delta S = S_{\mu}(T, p) - S_0(T_0, p_0) = \int_{T_0}^T \frac{c_p}{T} dT - R \int_{p_0}^p \frac{dp}{p} \approx \bar{c}_p \ln \frac{T}{T_0} - R \ln \frac{p}{p_0}. \quad (21)$$

Таким образом, подставив в уравнение (19) уравнения (20)-(21), получим:

$$e_{\phi} = \bar{c}_p (T - T_0) - T_0 \left(\bar{c}_p \ln \frac{T}{T_0} - R \ln \frac{p}{p_0} \right). \quad (22)$$

При условии стабильного химического состава потока вещества удельную эксергию e (в расчете на единицу массы) рассчитывают по уравнению

$$e = (H_{\mu} - H_0) - T_0 (S_{\mu} - S_0) \quad (23)$$

где H_n и S_n - энтальпия и энтропия рабочего тела в начальном (неравновесном) состоянии;

H_0 и S_0 - энтальпия и энтропия рабочего тела в конечном состоянии - состоянии термодинамического равновесия с окружающей средой;

T_0 - температура окружающей среды.

При этом потери эксергии в адиабатической системе определяются произведением температуры окружающей среды на прирост энтропии вследствие необратимости процесса. Они равны

$$D = T_0 (S_n - S_0) \quad (24)$$

Если давление в системе отличается от давления окружающей среды, то удельную эксергию рассчитывают по уравнению:

$$e = RT_0 \ln p / p_0 + H - H_0 - T_0 (S - S_0) \quad (25)$$

где p - давление системы; p_0 - давление окружающей среды.

Критерием термодинамической эффективности процесса является **эксергетический коэффициент полезного действия** $\eta_{\text{э}}$:

$$\eta_{\text{э}} = \frac{\sum E_{\text{вых}}}{\sum E_{\text{вх}}} = \frac{\sum E_{\text{вх}} - \sum \Delta E}{\sum E_{\text{вх}}} = 1 - \frac{\sum \Delta E}{\sum E_{\text{вх}}}, \quad (26)$$

где $\sum E_{\text{вх}}$ - сумма потоков эксергии на входе в систему, $\sum E_{\text{вых}}$ - сумма потоков эксергии на выходе из системы.

По разности величин $\sum E_{\text{вх}} - \sum E_{\text{вых}}$ определяют суммарную величину потерь эксергии $\sum \Delta E$.

Потери эксергии (максимально возможной работы) происходят из-за необратимости протекающих процессов (D), естественных потерь, вызванных взаимодействием системы с окружающей средой и потерями потоков.

Потери из-за необратимости процессов в ХТС (внутренние потери) связаны с гидравлическим сопротивлением потоков, теплообменом при конечной разности температур, массообменом при конечной разности концентраций и др. К естественным (внешним) потерям относятся потери эксергии через тепловую изоляцию, потери с потоками, выходящими из системы с продуктами сгорания, с воздухом после воздушных холодильников, с водой после теплообменников, с побочными продуктами химического процесса.

Для идеальных процессов $\eta_{\text{э}} = 1$, для реальных процессов всегда $\eta_{\text{э}} < 1$.

Рассмотрим процесс теплообмена между горячим потоком А с температурой T_A и холодным потоком В с температурой T_B в элементарном объеме теплообменника. Горячий поток А передает тепловую энергию холодному потоку В, величину которой для элементарного объема обозначим dQ .

Тогда, учитывая, что энтропия $S = Q/T$, можно записать величину эксергии, которую может передать горячий поток при переходе к состоянию равновесия с окружающей средой

$$dE_A = (1 - \frac{T_0}{T_A})dQ \quad (27)$$

Холодный поток B при теплообмене получает лишь часть этой величины

$$dE_B = (1 - \frac{T_0}{T_B})dQ \quad (28)$$

Разность между этими величинами дает потери эксергии в элементарном объеме

$$dE = dE_A - dE_B = T_0 dQ \cdot \frac{T_A - T_B}{T_A \cdot T_B} \quad (29)$$

Полученное уравнение (29) показывает, что потери эксергии в системе зависят от конечной разности температур потоков и температурного напора. Потери эксергии при одинаковой разности температур намного меньше в условиях высокой температуры, чем в условиях низкой. Поэтому с точки зрения энергетики выгоднее осуществлять процессы при высокой температуре, поскольку энергия высокотемпературных отходящих потоков может быть использована со значительно меньшими потерями.

По величине рассчитанного эксергетического КПД делают вывод о термодинамической эффективности того или иного процесса. Как правило, значения энергетического и эксергетического КПД не совпадают. Последний показатель для большинства химико-технологических процессов, в которых водяной пар или отходящие газы полезно не используются, имеют более низкое значение, чем энергетический (энтальпийный) КПД. Значимое отклонение эксергетического КПД от единицы показывает наличие принципиально устранимых потерь эксергии, уменьшение которых возможно при более рациональном проведении процессов и использовании более совершенного оборудования.

Применение эксергетического метода при анализе ХТС имеет особенности. Потенциалы всех потоков и, следовательно, их ценность выражается в тепловых единицах. Потребительская ценность химического продукта, конечно, иная. В теплоэнергетике, где потребительская ценность и энергетический потенциал потока совпадают, эксергетический метод находит наибольшее применение.

Из-за физико-химических ограничений в производствах химической технологии переработке подвергаются разбавленные смеси. В производстве азотной кислоты расходуется около 30% аммиачно-воздушной смеси, а в синтезе аммиака реагирует лишь около 20% азотоводородной смеси. В процессах парциального окисления многих углеводородов более 90% смеси не участвует в превращениях. Но, тем не менее, эта часть потока нагревается и охлаждается, проходя систему, и тем самым увеличивает эксергетические потери. Поэтому и эксергетический КПД таких процессов низок – для производства HNO_3 $\eta_{\text{ex}} = 22\%$, хотя NH_3 почти полностью переходит в продукт. При эксергетическом анализе ХТС это обстоятельство надо иметь в виду, чтобы не абсолютизировать результаты. Тем не менее, эксергетический анализ полезен как любой вид анализа химического производства.

Иногда эксергетический анализ применяют для принятия окончательного решения при выборе способа (из нескольких альтернативных) получения определенного продукта из одного и того же сырья. Чем выше будет η_{ex} в одном из способов, тем лучше эффективность использования потенциала сырья, энергии и вспомогательных материалов.

2.4. Эффективность организации процесса в ХТС

Состояние ХТС, определенное из материального и теплового балансов, позволяет получить значения показателей химического производства. Для этого необходимо знать, прежде всего, технологическую схему всего производства и его оборудование. Эти показатели характеризуют эффективность организации процесса в ХТС по разным признакам. Для промышленных систем наиболее важным будет определение экономической эффективности производства, включая приведенные затраты, себестоимость продукции, прибыль от ее реализации. Ниже приведем данные только по структуре расходов на производство – себестоимости продукции. Она включает составляющие, указанные в табл. 5.

Таблица 5
Относительные значения составляющих себестоимости продукции

Статьи затрат	Отрасли химической промышленности			
	основная химия	азотная промышленность	пластмассы	красители, органические продукты
Сырье и материалы	55,5	31,2	71,5	61,4
Топливо и энергия	12,5	33	4	7,3
Содержание и эксплуатация оборудования	13	16,8	6,5	9,5
Основная и дополнительная зарплата	3,8	3,7	4,3	4,4
Цеховые, заводские и другие расходы	15,2	15,3	13,7	17,4

В химических производствах основное соотношение между капитальными затратами примерно следующее: машины, оборудование и приборы составляют 30 – 40%, здания и сооружения – 50 – 55%, транспортные средства – 3 – 4%.

Основные составляющие затрат химического производства (сырье и материалы, энергетика, оборудование см. табл.5) существенно зависят от вида производства и определяются степенью конверсии сырья, селективностью и интенсивностью процессов. В свою очередь, эти показатели связаны с особенностями термодинамики и кинетики химических реакций, положенных в основу конкретной ХТС.

Снижение себестоимости может быть связано с уменьшением затрат ресурсов путем использования более дешевых видов сырья и энергии, уменьшением расходных коэффициентов за счет повышения конверсии и селективности процессов, более полного использования ресурсов за счет их рекуперации, сокращения капитальных затрат за счет использования более производительного оборудования и уменьшения стадийности производства и пр. Эти вопросы во многом решаются на этапе синтеза (построения) ХТС.

3. СИНТЕЗ ХТС

Синтез (построение) ХТС заключается в определении типов элементов и структуры технологических связей между ними (т.е. технологической топологии ХТС), определении параметров технологических режимов отдельных аппаратов и системы в целом для обеспечения наилучших условий функционирования ХТС (оптимальных значений критериев эффективности).

В общем виде задача синтеза формулируется следующим образом.

Дано:

- состав и состояние входного (сырьевого) потока ХТС;
- состав и состояние выходного (продуктового) потока ХТС;
- основные стадии ХТП переработки сырья в продукты и их характеристики;
- показатель качества функционирования ХТС;
- некоторые ограничения на параметры;
- возможные аппаратурные решения для осуществления ХТП.

Определить:

- состав ХТС (аппараты, входящие в ХТС),
- структуру ХТС (связи между аппаратами),
- режимные и конструктивные параметры аппаратов и системы в целом,

обеспечивающих необходимые показатели производства и его функционирование.

При решении задачи синтеза ХТС, первоначально должен быть определён путь проведения процесса (химизм), и только затем становится возможным произвести синтез структуры ХТС, определение параметров работы её элементов и параметров потоков, связывающих эти элементы.

Процесс синтеза ХТС - сложный многовариантный процесс, т.к. захватывает многие вопросы разработки, создания или усовершенствования производства. Например, при построении системы может возникнуть необходимость проработки задачи использования альтернативного сырья или источника энергии, рассмотрения вариантов стадийности процесса или принципиально другого аппаратурного оформления процесса.

Таким образом, синтез ХТС - задача и процесс, требующие поиска лучших решений, уточнения каждого шага в поиске наилучших решений.

3.1. Методы решения задачи синтеза

Современное промышленное производство представляет собой настолько сложный технологический комплекс, что его разработка, проектирование и эксплуатация требуют системного подхода.

Системный подход в химической технологии – это методологическое направление, основная цель которого состоит в разработке общей стратегии, а также неформализованных (эвристических), или формализованных методов комплексного исследования и создания сложных ХТП и ХТС различных типов.

Сложная и многовариантная задача синтеза ХТС является общей задачей нелинейного программирования. Однако даже частные задачи синтеза не могут быть решены методами нелинейного программирования. Главные причины – большая размерность пространства поиска и многоэкстремальность целевой функции.

Для решения задач синтеза используются следующие методы: декомпозиционный, аналитический, эвристический, интегральный и эволюционный.

Декомпозиционный метод. Для снижения количества рассматриваемых вариантов обычно проводят декомпозицию задачи синтеза ХТС на ряд подзадач или уровней, т.е. используют *декомпозиционный метод*. При использовании наиболее простой – двухуровневой декомпозиции, на верхнем уровне будет происходить синтез ХТС из подсистем (химического взаимодействия, разделения, смешения и пр.) и определяться значения параметров потоков, связывающих эти подсистемы. На нижнем уровне будет производиться синтез самих подсистем и определяться значения параметров потоков, связывающих аппараты, входящие в данные подсистемы.

Пример семи - уровневой декомпозиции:

1. Выбор маршрутов и условий проведения реакций.
2. Определение оптимальных систем химических реакторов.

3. Определение оптимальных систем разделения смесей.
4. Выбор вспомогательных подсистем.
5. Определение оптимальных систем теплообменников.
6. Качественный анализ надежности ХТС.
7. Анализ динамических свойств ХТС (скорости; тепловые мощности процессов; реальное время протекания химических превращений, массообменных, тепловых и иных процессов).

Однако даже задача синтеза подсистем является достаточно сложной и требует дополнительных декомпозиций или применения других методов синтеза.

Разработаны и развиваются специальные методы решения задач синтеза. Эти методы можно разделить на *аналитические* и *эвристические*, *интегральные* и *эволюционные*.

Аналитические методы – основаны на выборе решения, удовлетворяющего некоторым необходимым и/или достаточным условиям оптимальности искомых параметров ХТС. Аналитические методы, дающие точное решение, могут быть использованы только для некоторых частных задач синтеза подсистем, из-за невозможности получения условий оптимальности.

Эвристические методы – основаны на выборе решения, удовлетворяющего некоторым эвристическим условиям оптимальности искомых параметров ХТС.

Эвристика (от древнегреческого *εὐρίσκω* – «отыскиваю», «открываю») – совокупность логических приемов, методов и правил, облегчающих и упрощающих решение познавательных, конструктивных, практических задач.

Эвристический алгоритм — алгоритм решения задачи, не имеющий строгого обоснования, но, тем не менее, дающий приемлемое решение задачи в большинстве практически значимых случаев.

Эвристический подход позволяет высококвалифицированным специалистам интуитивно выбирать наиболее удачные варианты решения проблемы без полного перебора всех возможных альтернативных вариантов.

Типы эвристик:

эвристики обобщающие практический опыт (позволяющие выделить наименее эффективные элементы или узкие места в исходном варианте технологической топологии ХТС);

интуитивные эвристики (позволяющие определить возможные варианты модификации или усовершенствования узких мест ХТС);

эвристики, базирующиеся на знаниях высококвалифицированных специалистов (обеспечивающие возможность "стыковки" модифицированного элемента ХТС с немодифицированной частью ХТС).

Примеры эвристик для частных задач синтеза оптимальных схем теплообмена и оптимальных схем разделения смесей см. Приложение 1.

Интегральные методы основаны на поиске оптимальной структуры в результате глобального изменения структуры технологической схемы. Для интегральных методов необходима исходная (базисная) структура, которая, как правило, строится эвристически.

Суть интегральных методов расчета ХТС заключается в объединении систем уравнений, описывающих работу отдельных аппаратов, в одну большую систему уравнений с дальнейшим решением этой системы.

Например, единая система уравнений, включающая линейные уравнения материального и теплового балансов, нелинейные уравнения равновесий химических реакций, дифференциальные линейные и нелинейные уравнения, уравнения гидродинамики в частных производных и т.д., в общем виде может быть представлена следующим образом:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum G_i = 0 - \text{уравнение материального баланса,} \\ \sum Q_i = 0 - \text{уравнение теплового баланса,} \\ \frac{dx_i}{d\tau} = k C_A^m C_B^n - \text{кинетическое уравнение химической реакции,} \\ \frac{dy_i}{dz} = f(\text{Re, Ar, Pr, Nu и т.д.}) - \text{уравнение гидродинамики;} \\ \text{и т.д.} \end{array} \right. \quad (30)$$

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

Эволюционные (последовательные) методы предполагают последовательное изменение элементов системы. Сущность эволюционных методов заключается в последовательной модификации аппаратного оформления и структуры технологических связей некоторого исходного варианта ХТС с использованием методов эвристики и оптимизации. Примерная последовательность синтеза эволюционным методом:

- создание исходного варианта технологической топологии ХТС, например, с помощью эвристического принципа синтеза;
- обнаружение "узкого" места ХТС путем анализа данного варианта, определение критерия оптимальности, модификация аппаратного оформления и структуры технологических связей;
- следующий расчет критерия оптимальности и новый поиск "узкого" места ХТС.

Процесс модификации ХТС производится до тех пор, пока не будет достигнуто требуемое значение критерия оптимальности. Таким образом, процесс состоит из последовательного итерационного чередования этапов синтеза, анализа, оптимизации и модификации некоторого первоначально заданного технологического решения задачи синтеза ХТС или существующей технологической схемы.

Действующие методы синтеза являются комбинированными: аналитические комбинируются с эвристическими, интегральные с последовательными.

Продemonстрируем в общих чертах эволюционный подход последовательных приближений на примере разработки производства азотной кислоты.

Сырье – аммиак и воздух (кислород воздуха). В ходе процесса осуществляются следующие химические превращения (26)-(28).

Экзотермическая реакция окисления аммиака (26), протекает во внешнедиффузионной области на платиновом катализаторе в виде сеток; температура – 850 – 900 °С; концентрация NH₃ – 10%:



Окисление оксида азота - экзотермическая, газофазная, обратимая реакция.



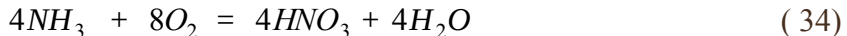
Гетерогенный («газ-жидкость») химический процесс (абсорбция) с дополнительным окислением.



На первом этапе представим ХТС, состоящую из элементов, в которых происходят описанные превращения (рис. 21, а). Аммиак окисляется в адиабатном реакторе 6. После этого газообразные компоненты охлаждаются в холодильнике 8 для более полного окисления оксида азота NO в диоксид NO₂ в окислителе 9. Абсорбция с дополнительным окислением осуществляется в абсорбционной колонне 11.

Проведем экспертизу полученной ХТС, в результате которой возникают следующие замечания.

1. Без нагнетателя воздух сам в систему не пойдет – необходим компрессор.
2. Аммиак поступает в жидком виде, а дозировка низкокипящей жидкости очень затруднена - для получения газообразного аммиака необходим испаритель (подогреватель) аммиака.
3. Адиабатический разогрев аммиачно-воздушной смеси - 720 град. Чтобы обеспечить температуру процесса 850-900 °С температура на входе в реактор 6 должна быть не менее 130-180 °С – перед реактором требуется теплообменник для подогрева аммиачно-воздушной смеси.
4. Окисление NO - реакция экзотермическая, а высокая температура газа ухудшает абсорбцию оксидов азота – перед абсорбцией газы необходимо охладить в холодильнике.
5. Высокотемпературные газы, выходящие после реактора окисления аммиака 6 целесообразно использовать для утилизации теплоты с получением пара – для этого нужно установить котел-утилизатор.
6. В реакторе окисления аммиака установлено оптимальное соотношение NH₃:O₂=1:1,8, а суммарный расход кислорода составляет два объема на один объем аммиака:



При первоначальном 10%-ном содержании аммиака в воздухе содержание кислорода недостаточно для нормального протекания реакции (28) – необходимо добавить дополнительное количество кислорода (воздуха).

7. Эти замечания учтены во втором варианте ХТС (рис.21, б), на схеме которого в соответствии с номером замечания (в скобках) отмечены добавления (аппараты и связи) к первому варианту.

Следующая экспертиза выявляет новые замечания.

7. Катализатор очень чувствителен к загрязнениям, а воздух не очищен – для очистки добавляем воздушный фильтр.

8. Размещение отдельно установленных подогревателя исходной смеси 5 и холодильника нитрозных газов 8 нерационально – рационально осуществлять подогрев исходной смеси за счет тепла нитрозных газов.

9. В результате реакции окисления аммиака образуется довольно много воды, и при охлаждении газов перед абсорбцией последняя будет конденсироваться в теплообменнике и частично поглощать оксиды азота, образуя кислый конденсат – целесообразно сконденсированную воду отводить в абсорбционную колонну.

10. В образующейся азотной кислоте будет растворено некоторое количество оксидов азота, что плохо скажется на ее качестве. Продукт будет иметь желтоватый цвет и выделять оксиды азота. Для поглощения NO и NO₂ кислота направляется в отбелочную колонну.

Третье решение (рис.21, в) еще больше улучшает организацию ХТС производства HNO₃. Такая эволюционная разработка будет продолжаться до тех пор, пока не будут удовлетворены все требования.

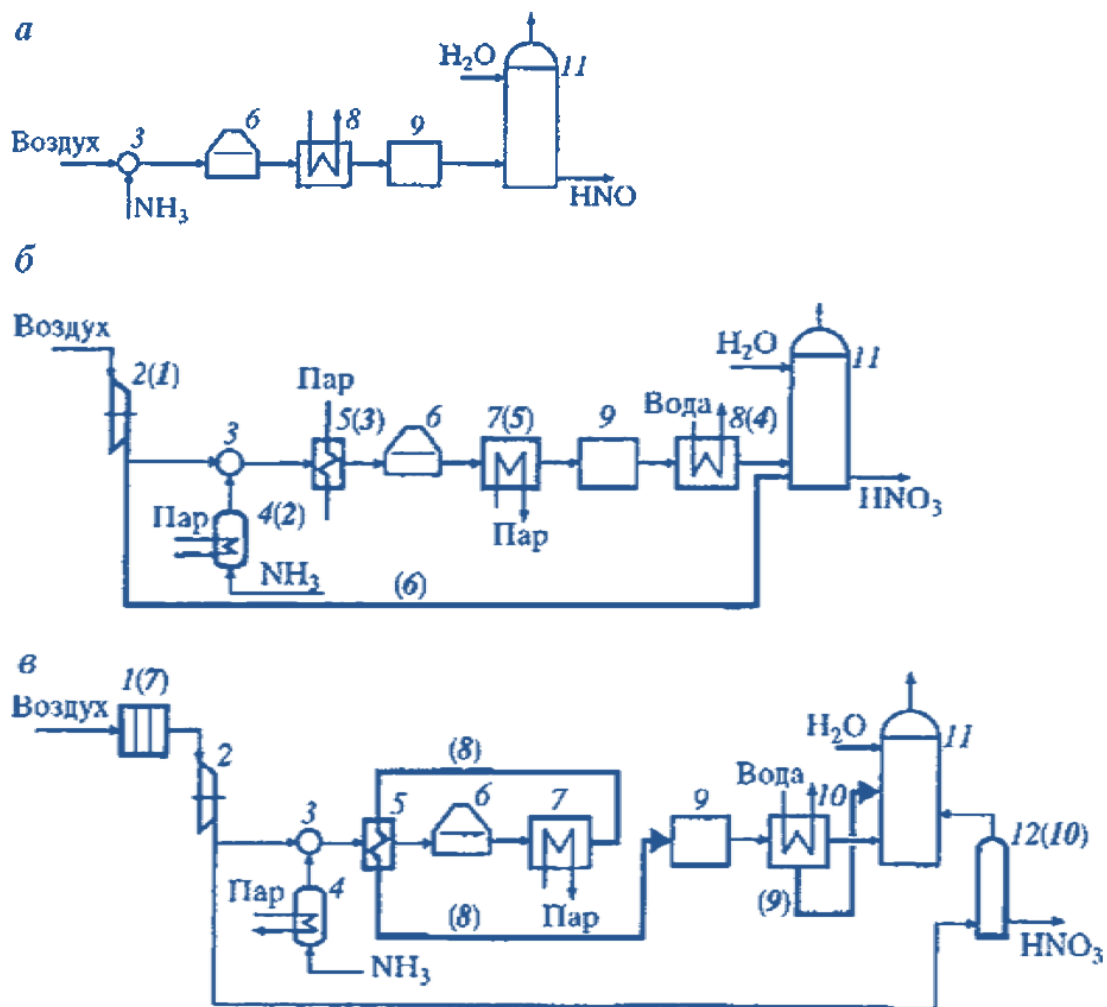


Рис. 21. Эволюция ХТС (а, б, в) при разработке производства азотной кислоты
 1- воздушный фильтр; 2- компрессор; 3- смеситель; 4- испаритель; 5- теплообменник; 6- реактор; 7- котел-утилизатор; 8- холодильник; 9- окислитель; 10- холодильник конденсатор; 11- абсорбционная колонна; 12- отбелочная колонна.

3.2. Концепции создания ХТС

Концепции создания ХТС предполагают выполнение обязательных требований при синтезе ХТС. Они основаны на теоретических закономерностях ХТП, проверены и подтверждены практикой и позволяют повысить эффективность поиска решений.

С помощью концепций формулируется ряд возможных вариантов (эвристик) ХТС, из которых далее, используя метод математического моделирования, выбирают наилучший.

Каждая новая ХТС должна формироваться при условии выполнения следующих четырех главных технологических концепций.

1. Полное использование сырья:

- использование избытка одного из реагентов (обычно наиболее дешевого);
- противоточный контакт фаз;
- правильный выбор процесса;
- использование рецикла;
- использование регенерации вспомогательных материалов с их рециклом;

- утилизация отходов;
- альтернативное сырье;
- комбинирование производств. Комплексное использование сырья.

2. Минимизация энергетических и тепловых затрат:

- рекуперация теплоты;
- регенерация энергии;
- утилизация теплоты отходящих газовых потоков.

3. Минимизация отходов.

4. Оптимальное использование оборудования:

- интенсификацией процесса в аппарате;
- улучшением организации процесса в аппарате;
- лучшими конструктивными решениями;
- увеличением мощности оборудования.

Рассмотрим более подробно указанные концепции.

3.2.1. Концепция полного использования сырья

В большинстве химических производств затраты на сырье составляют значительную часть себестоимости продукции (см. табл.5).

Концепция полного использования сырьевых ресурсов направлена на максимальное превращение сырья в используемые, полезные продукты.

Низкая степень использования сырья возникает по следующим причинам:

- термодинамическим (состояние равновесия обратимых реакций не позволяет проводить до конца основную реакцию);
- кинетическим (не достигается теоретически возможная степень превращения из-за низких скоростей реакции);
- обусловленным механизмом процесса (например, наличием побочных взаимодействий и др.);
- технологическим и конструктивным, возникающих на уровне организации производства.

Отсюда формируются основные приемы для увеличения степени использования сырья, базирующиеся на основных химических закономерностях.

Избыток одного из реагентов, как правило, более дешевого и доступного, а также возможность его возвращения в процесс приводят к улучшению использования сырьевых ресурсов. В данном случае используют два фактора влияния избытка реагента на увеличение выхода продукта – термодинамический и кинетический.

а) *Термодинамический фактор* предполагает избыток одного реагента для увеличения максимального, равновесного превращения другого. В паровой конверсии метана, протекающей по реакции



стехиометрическое соотношение реагентов $CH_4 : H_2O = 1 : 1$. В промышленных условиях ($p=30$ атм, $t=900^\circ C$) равновесная степень превращения метана x_p для исходной смеси указанного состава достигает значения 0,58. При соотношении $CH_4 : H_2O = 1 : 4$ (четыrehкратный избыток H_2O) - $x_p=0,92$. Именно такое объемное соотношение реагентов обычно используется в промышленности.

б). *Кинетический фактор* связан с особенностями механизма и кинетики протекающего процесса.

Рассмотрим реакцию окисления аммиака (см. уравнение (31)), которая протекает во внешнедиффузионной области и лимитируется переносом аммиака – его концентрация у поверхности катализатора мала. При различном соотношении реагентов определим их поверхностные концентрации, приняв степень превращения аммиака на поверхности катализатора $x_n = 0,99$ (табл.6).

Таким образом, для получения целевого продукта NO необходим избыток кислорода, вытесняющий аммиак с поверхности катализатора. Именно это и определяет 10%-ное содержание NH_3 в аммиачно-воздушной смеси.

Таблица 6

Концентрации реагентов на поверхности катализатора при их различном соотношении в исходной смеси

Соотношение реагентов	Содержание аммиачно-воздушной смеси	Поверхностные концентрации реагентов	Основной продукт окисления
Стехиометрическое соотношение реагентов $O_2 : NH_3 = 1,25$	14% NH_3 и 17,5% O_2	$C_{NH_3,n} = 14(1-0,99) = 0,14\%$, $C_{O_2,n} = 17,5 - 1,25(14 \cdot 0,99) = 0,17\%$.	N_2
При избытке кислорода $O_2 : NH_3 = 1,8$	10% NH_3 и 18% O_2	$C_{NH_3,n} = 10(1-0,99) = 0,1\%$, $C_{O_2,n} = 18 - 1,25(10 \cdot 0,99) = 5,6\%$	NO

Противоточный контакт фаз – известное решение, обеспечивающее максимальную движущую силу процесса переноса, широко распространенным примером которого является противоточная организация движения теплоносителей в теплообменнике. Рассмотрим абсорбцию оксидов азота. На рис. 22, а показана зависимость равновесных парциальных давлений оксидов азота над раствором HNO_3 . Для максимального поглощения оксидов азота (т.е. их минимального давления) жидкая фаза должна быть слабокислой. Это осуществляется в абсорбере с противоточным движением фаз (рис.22, б). Верху абсорбера, где подается вода, концентрация кислоты минимальна. Здесь поглощение происходит почти полностью и выходящие газы содержат небольшое количество оксидов азота. Такое явление используется во всех сорбционных процессах.

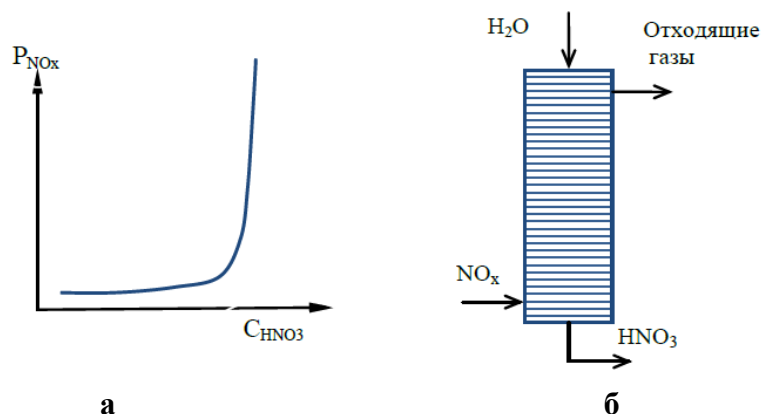


Рис. 22. Зависимость равновесных парциальных давлений оксидов азота NO_x (p_{NO_x}) над раствором HNO_3 от ее концентрации C_{HNO_3} (а) и схема абсорбционной колонны (б)

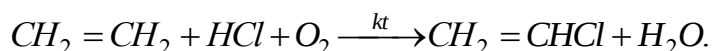
Выбор процесса – важнейший способ улучшения использования сырьевых ресурсов. Рассмотрим на примере получения хлорвинила.

Получение хлорвинила в две стадии. Сначала хлорируют этилен, а затем проводят пиролиз образовавшегося дихлорэтана:



Избирательность каждой из стадий около 95%. Образующийся HCl относят к отходам. Выход хлорвинила по этилену составляет 90%, по второму исходному веществу, хлору - 50%.

При переходе к одностадийной схеме окислительного гидрохлорирования этилена по реакции

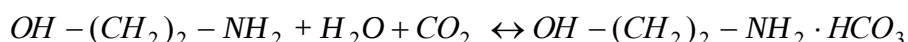


удалось разработать процесс с избирательностью 95% с 95%-ным выходом продукта по обоим исходным компонентам.

Фракционный рецикл используют при неполном превращении исходных реагентов. В системе разделения, расположенной после реактора, непрореагировавшие реагенты выделяют и возвращают на переработку, вследствие чего суммарный выход продукта увеличивается. Например, за один проход ABC через колонну синтеза при производстве NH_3 степень ее превращения не превышает 14-20 %. Поэтому образовавшийся аммиак конденсируется и отделяется от непрореагировавшей ABC, которая возвращается в цикл производства.

Другой пример: многие процессы нефтехимического синтеза характеризуются образованием широкого спектра продуктов. Их разделение проводят в многоколонной системе, а непрореагировавшие компоненты возвращают в систему смешивая их со свежей смесью. В такой организации процесса при неполном превращении реагентов в реакторе общее превращение исходного компонента в системе будет практически полным.

Регенерация с рециклом заключается в регенерации вспомогательного материала после его использования с последующим возвращением в процесс. Например, в схеме очистки ABC смеси от CO_2 в производстве аммиака абсорбция CO_2 проводится раствором моноэтаноламина (МЭА) по реакции



После абсорбции раствор подают на регенерацию в десорбер, где при повышенной температуре происходит десорбция CO_2



Регенерированный раствор МЭА возвращают на абсорбцию CO_2 .

Циклическое использование материалов характерно для процессов с регенерацией отработанного катализатора. Например, в процессе каталитического крекинга нефтепродуктов поверхность катализатора постепенно покрывается пленкой углерода, который образовывается вследствие побочных реакций глубокого расщепления углеводородов, после чего активность катализатора резко уменьшается. Регенерация катализатора состоит в выгорании углерода в потоке воздуха при повышенной температуре, после чего катализатор подается снова в контактный аппарат крекинга.

Утилизация отходов. Это направление дает возможность получать полезные продукты из отходов производства. *Отходы* - это вещества не имеющие потребительской ценности. Если им находят применение, они становятся вторичным материалом. При этом выход целевого продукта не изменяется, однако общая степень превращения сырья возрастает.

В производстве аммиака воздух используют как источник азота. Вместе с ним в АВС попадает содержащийся в воздухе аргон. На стадии синтеза аммиака осуществляется фракционный рецикл АВС. Аргон не выводится с аммиаком и накапливается в циркулирующем потоке. Чтобы избежать его значительного накопления, приходится часть потока выводить (т.е. проводить отдувку). Выделяя аргон из отходящего газа, в котором концентрация значительно выше, чем в воздухе, получают дополнительный ценный продукт.

Альтернативное сырье. Использование невозобновляемого сырья заставляет не только искать способы более полного использования, но и его замену другими видами сырья, поэтому одним из направлений расширения сырьевых источников является использование отходов других производств, а другим — поиск альтернативных источников первичного сырья.

Получение сырья для нефтехимической промышленности в основном базируется на двух самых распространенных процессах нефтепереработки - термическом пиролизе (этилен и другие низшие олефины) и каталитическом риформинге (бензол и другие ароматические углеводороды). Нефтепереработка обеспечивает выработку также и других важных продуктов, таких, как моторные топлива (бензин, дизельное топливо и другие). Относительная ограниченность запасов нефти при высоких объемах ее добычи, ухудшение ее качества и, как следствие, значительный рост затрат на их разработку обуславливают изменение структуры и диверсификацию сырья для получения моторных топлив и продуктов органического синтеза. В этом отношении перспективным альтернативным сырьем является уголь, как наиболее распространенное углеродосодержащее полезное ископаемое. Известны методы превращения угля в жидкие углеводороды и топливо. Большое значение приобрели процессы гидрогенизации угля и его газификация до CO и H_2 (производство синтез-газа) с последующим каталитическим синтезом углеводородов.

В качестве другого альтернативного источника не нефтяного происхождения можно также рассматривать биомассу, которая путем ферментации способна превращаться в биоэтанол, в результате каталитической конверсии которого могут быть получены ценные органические соединения, а также водород.

Комбинирование производств. Комплексное использование сырья. Комбинирование (объединение) производств дает возможность использовать побочные продукты в другом химическом производстве, которое создается вместе с главным. Например, CO_2 , который выделяется вследствие очистки АВС во время производства аммиака, можно подать на синтез карбамида по суммарной реакции



комбинируя это производство с производством синтезом аммиака (рис. 23).

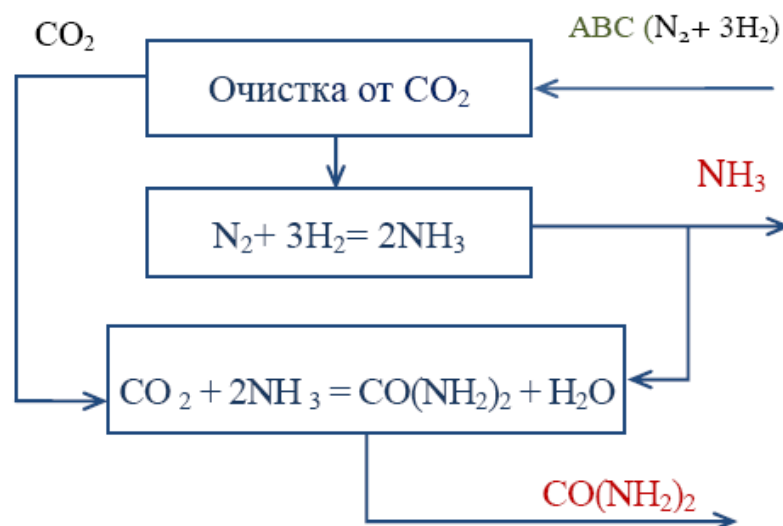


Рис. 23. Схема комбинирования производств аммиака и карбамида

Как правило, основные источники природного сырья кроме необходимого компонента содержат и другие ценные вещества. Например, в железной руде часто присутствуют медь, титан, ванадий, кобальт, цинк, фосфор, сера, свинец и другие редкие элементы. В полиметаллических рудах содержится более 50 ценных элементов, в том числе: олово, медь, кобальт, вольфрам, молибден, серебро, золото, металлы платиновой группы. Часто сопутствующие элементы обладают большей ценностью, чем основные, ради которых организовано производство. В природном газе находятся азот, гелий, сера, а в составе газового конденсата - гомологи метана. В нефти содержатся различные соединения серы и им сопутствуют попутные газы, в состав которых входят ценные углеводороды, а также пластовые воды с содержанием йода, брома и бора. Полное использование вещественного потенциала сырья выходит за рамки одной ХТС и становится возможным только при комплексной переработке сырьевых ресурсов, обеспечиваемой многими отраслями промышленности.

3.2.2. Минимизация энергетических и тепловых затрат

При организации ХТС энергетические проблемы имеют ресурсосберегающий, экологический и экономический характер.

Экономический аспект энергетической проблемы связан с тем, что в себестоимости химической продукции доля энергии составляет до 60% от затрат на сырье. Поэтому одной из основных задач энергосберегающих технологий является снижение затрат энергии на единицу продукта и уменьшение тепловыделения в окружающую среду. Эти задачи должны решаться за счет внутренних энергетических ресурсов, которыми обладают многие ХТС, например:

- тепло, выделяемое в результате экзотермических процессов: отводится для поддержания оптимальных температур в реакторе, для регулирования качества продукта или для безопасных условий ведения процесса;
- тепло эндотермических процессов, если они проводятся при высоких температурах, может являться дополнительным источником тепла в системе;
- тепло веществ, являющихся отходами в основном производстве (например, в производствах органического синтеза), которые при определенных условиях способны служить топливом.

Однако использование энергоресурсов в химических производствах связано с трудностями, основными из которых являются:

-рассредоточенность источников энергии в пространстве (особенно для малотоннажных производств) и во времени (в периодических процессах);

- малое количество энергоресурсов на единицу оборудования и в единицу времени;

- значительные потери тепла в окружающую среду;

- трудности использования тепла экзотермических низкотемпературных процессов.

Основным направлением в повышении энергетической эффективности химических производств является снижение их энергоемкости. Этому способствует:

- перевод производства на непрерывную технологию;

- использование топливного потенциала горючих отходов;

- создание агрегатов большой единичной мощности, позволяющих концентрировать энергию;

- рациональная организация энерготехнологических агрегатов.

В результате анализа эффективности разрабатываемой ХТС путем термодинамического анализа и расчета теплового баланса становятся ясными потенциальные энергетические возможности системы и следующим этапом, в соответствии с этим, является рациональное инженерное оформление данного химико-энергетического элемента или системы в целом. Задача этого этапа - снизить затраты энергии на единицу выпускаемого целевого продукта и сократить потери тепла в окружающую среду.

В зависимости от типа реализуемого процесса для этой цели используют ряд приемов.

Регенерация теплоты - использование тепла отходящих продуктов реакции для нагрева входящих потоков (см. рис. 19). Наиболее результативным будет достижение такого решения в случае протекания экзотермической реакции. Подобные схемы регенерации теплоты широко распространены в промышленности.

Регенерация энергии. Этот прием используется в тех случаях, когда производство содержит процессы под давлением.

Регенерация энергии - это использование остаточной энергии после завершения конкретного процесса под давлением в том же самом или другом процессе. Исходный газ сжимается в компрессоре и направляется в технологические аппараты. Оставшийся сжатый газ направляется в турбину, находящуюся на одном валу с компрессором и приводящую его в действие (рис. 24). При этом расходы на энергию для привода компрессора будут значительно уменьшены.

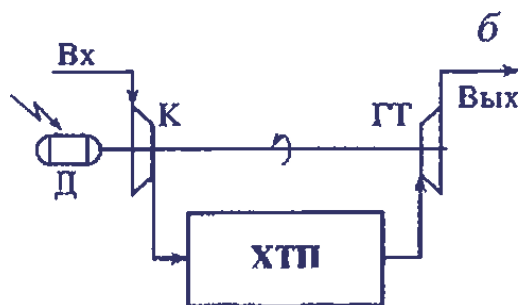


Рис. 24. Схема регенерации энергии с дополнительным приводом компрессора от газовой турбины

К - компрессор; Д - основной электрический привод; ГТ - газовая турбина.

Утилизация теплоты и энергии заключается в использовании теплоты (энергии) потока для выработки тепловых (пар, горячая вода), электрических и других энергетических ресурсов, применяемых не в самом производстве. Такие потоки, обладающие определенной энергией, являются *вторичными энергетическими ресурсами* (ВЭР). К ВЭР относятся:

- горючие (топливные) отходы химических производств;
- тепловые выбросы, возникающие как побочный результат экзотермических реакций или содержащиеся в отработанных материалах;
- энергия избыточного давления (силовые ВЭР).

Концепция минимизации затрат теплоты и энергии наиболее полно реализуется в *энерготехнологических схемах*, объединяющих вышеперечисленные приемы.

Энерготехнологическая схема - ХТС включающая энергетический узел и позволяющая наиболее эффективно использовать энергетический потенциал топливных ресурсов и обеспечивающая автономную по энергии работу химического производства. В качестве примера рассмотрим энерготехнологическую схему получения конвертированного газа в производстве аммиака (рис. 25).

Конверсии природного газа (метана) (G_T) водяным паром осуществляется по реакции (см. уравнение (35)) на катализаторе в трубчатом реакторе-конверторе 2 при температуре 800°C под давлением 30 МПа. Процесс очень эндотермичен. Создание необходимой температуры процесса - около 800°C - достигается обогревом труб за счет сгорания природного газа (G_H) в межтрубном пространстве.

Горячие газы после трубчатого конвертора 2 используются для получения пара высоких параметров. Вода для получения пара сначала нагревается в теплообменниках всей технологической схемы производства аммиака, где можно регенерировать тепло процесса, и направляется в паровой котел 1, обогреваемый газами после трубчатого реактора.

Получаемый пар используется для привода турбокомпрессора высокого давления 3 и компрессора природного газа 5. Однако собранного тепла не хватает для обеспечения необходимой мощности турбокомпрессоров. Поэтому в топке 1 сжигают дополнительное количество природного газа, покрывая этот дефицит энергии. Таким образом, в технологической схеме производства аммиака появляется энергетический узел выработки пара высоких параметров, обеспечивающий энергией всё производство и максимально использующий тепло всех потоков этого же производства. При соответствующем выборе параметров энергетического узла вся химико-технологическая система становится автономной по энергии.

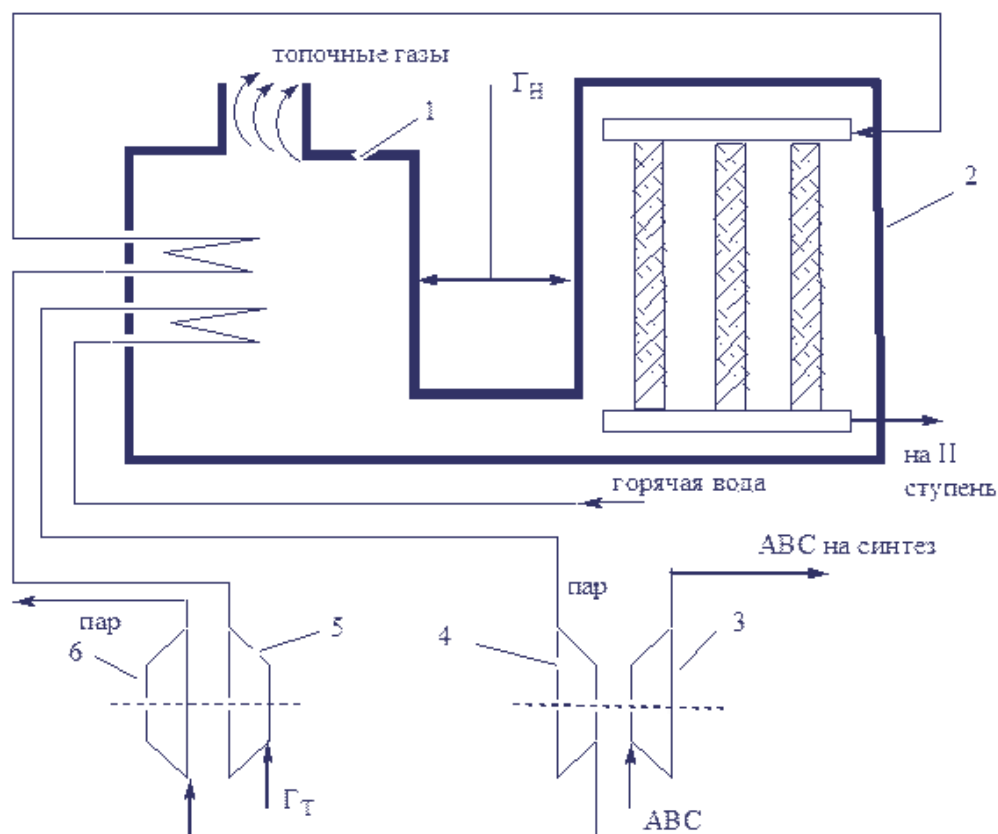


Рис. 25. Принципиальная схема энергетического узла в ХТС производства аммиака
1 - паровой котел; 2 - трубчатый реактор; 3 - турбокомпрессор высокого давления; 4,6 - паровая турбина; 5 – компрессор природного газа.

Альтернативные источники энергии. Кроме традиционно используемых источников энергии (пар, горячие теплоносители, электроэнергия), вырабатываемых при потреблении топливных ресурсов, в настоящее время перспективным направлением является использование легко возобновляемых и более дешевых источников, таких как теплота атомных котлов, солнечная энергия и др. Конечно, их применение очень специфично, но в ряде случаев это может реально привести к уменьшению расхода более дефицитных и дорогих топливных ресурсов.

Переход к процессу с меньшим числом стадий – как правило сокращает число нагревов и охлаждений потоков, затраты на преодоление гидравлического сопротивления.

3.2.3. Минимизация отходов

Минимизация отходов - одно из решений для создания экологически безвредных производств.

Эта концепция непосредственно связана с предыдущими, поэтому приведенные выше способы их реализации справедливы для создания безотходных производств.

Кроме этого имеются и свои специфические решения. К ним относятся: санитарная очистка и обезвреживание отходов, замкнутый водооборот, уменьшение вспомогательных потоков, повышение надежности оборудования.

Санитарная очистка и обезвреживание выбросов – предполагает установку подсистем ХТС, в которых вредные (токсичные) примеси удаляются из выбрасываемых потоков (санитарная очистка) или переводятся в нетоксичное состояние (обезвреживание).

Например, в производстве азотной кислоты, отходящий газ после абсорбции содержит 0,1 % оксидов азота, которые при взаимодействии с атмосферными осадками образуют кислотные дожди. Поэтому этот газ, получивший название "лисий хвост" из-за буро-желтого цвета, перед выбросом в атмосферу поступает на очистку в отбелочную колонну (см.рис.21 в), где осуществляется каталитическое восстановление оксидов азота до N_2 .

Уменьшение и замена вспомогательных потоков. Например, при охлаждении потоков до температуры окружающей среды используют водяные холодильники. Они подвержены коррозии (вода может разрушать аппаратуру из-за наличия растворенных в ней солей и кислорода воздуха), что приводит к возникновению аварийных ситуаций. Кроме того, для охлаждающего агента - воды - требуется сложная система очистки и отвода тепла от нее (утилизировать теплоту чуть теплой воды нерационально). Замена водяных холодильников на воздушные значительно упрощает систему охлаждения и уменьшает вредные выбросы.

Замкнутый водооборот - система промышленного водоснабжения и водоотведения, с многократным использованием воды в одном и том же производственном цикле, без сброса сточных и других вод в природные водоемы при минимальном восполнении потерь (подпитке).

При разработке новых технологических процессов необходимо предусматривать, во-первых, снижение потребления технологической воды и, во-вторых, многократное использование оборотной воды.

Вода в значительном количестве используется в химическом производстве как вспомогательный материал. Пройдя технологический цикл, она загрязняется и требует дорогостоящей очистки. Организация замкнутого водооборота позволяет избежать образования одного из отходов - загрязненной воды. Например, в настоящее время на Череповецком металлургическом комбинате ОАО «Северсталь» замкнутый водооборотный цикл доведен до 98,5%.

Повышение надежности оборудования и элементов ХТС, позволяет исключить потери в виде утечек и выбросов любых компонентов.

Согласно представлениям Д. И. Менделеева (1885), мерой совершенства производства является количество отходов. Идеальным решением претворения в жизнь концепции минимизации отходов было бы создание *безотходного производства*. Однако, понятие безотходное производство не следует воспринимать абсолютно, т.е. было бы ошибочным полагать, что может быть производство без отходов.

В настоящее время под *безотходной технологией* понимают такой способ производства, при котором сырье, материалы, энергия используется наиболее рационально и комплексно, и любые воздействия на окружающую среду не нарушают ее нормального функционирования.

Малоотходное производство - такой способ производства продукции, при котором вредное воздействие на окружающую среду не превышает уровня, допустимого санитарно-гигиеническими нормами. В малоотходных производствах выбросы вредных веществ не превышают ПДК, а также уровня, при котором предотвращаются необратимые экологические изменения.

Граница между этими понятиями является условной. Взаимодействием производства и окружающей среды занимается раздел науки "Промышленная экология".

3.2.4. Эффективное использование оборудования

Концепция направлена на минимизацию капитальных затрат на технологическое оборудование путем создания условий протекания в нем процессов с максимальной возможной эффективностью.

Реализация этого принципа предполагает следующие решения:

1) Интенсификация процесса в аппарате за счет выбора нового процесса (например, использование более активного катализатора), оптимизация режима. На разработку новых катализаторов и их внедрение требуются большие материальные затраты. В зависимости от специфики технологии до 90% средств при разработке нового процесса идет на катализатор, в связи с этим один из путей, связанных с применением каталитических процессов – это разработка наиболее эффективных каталитических систем, другой - выявление и исследование новых каталитических свойств недорогих катализаторов.

2) Улучшение организации процесса в аппарате, что позволяет снизить диффузионные и тепловые сопротивления, а также увеличить движущую силу процесса. Почти всегда один и тот же процесс можно провести разными способами. Например, процесс теплообмена можно провести противотоком или прямотоком, гетерогенно-каталитический процесс - в неподвижном или движущемся (псевдоожигенном) слое катализатора и т.д. Традиционный пример сокращения затрат на теплообменнике - использование противотока теплоносителей.

3) Организация технологического процесса в подсистеме ХТС. Усовершенствование одного элемента дает выигрыш в эффективности процесса, протекающего в системе в целом (см. раздел 1.8). Например, при замене периодического процесса на непрерывный, отпадает необходимость в дополнительной аппаратуре для исходных реагентов и продуктов, очистке периодических аппаратов и т.д. Организация технологической схемы с рециклом по непревращенному сырью повышает степень превращения сырья в продукт. Однако, такие решения предполагают поиск экстремума (оптимизацию), так как увеличение эффективности часто приводит к повышению затрат на производство.

4) Конструктивные решения аппаратов, позволяющие уменьшить объем его непроизводительных частей, т.е. уменьшить материалоемкость оборудования. Например, замена каталитических аксиальных реакторов (рис.26 а) на радиальные (рис. 26 б, в) позволяет сократить объемы у входа и выхода реактора, т.е. получить более компактную конструкцию, а также создать слой катализатора большего сечения и меньшей толщины для прохождения потока, что способствует сокращению энергетических расходов. Кроме того, горизонтально расположенные аппараты (см. рис. 26 в) позволяют отказаться от дорогостоящих опорных конструкций и специального оборудования для обслуживания высоких аппаратов.

5) Увеличение единичной мощности позволяет снизить удельные затраты на аппаратуру. Ориентировочно, удвоение мощности приводит к уменьшению удельных затрат на 8 - 15 %.. *Поэтому создание крупнотоннажных производств всегда более выгодно, чем строительство малотоннажных установок.*

Приступая к решению задач синтеза, полезно иметь ввиду следующие общие замечания.

Практика показывает, что функция цели (показатель качества функционирования) наиболее чувствительна к структуре системы, поэтому синтез оптимальной структуры дает эффект на порядок больше, чем оптимизация режимных и конструктивных параметров при фиксированной структуре.

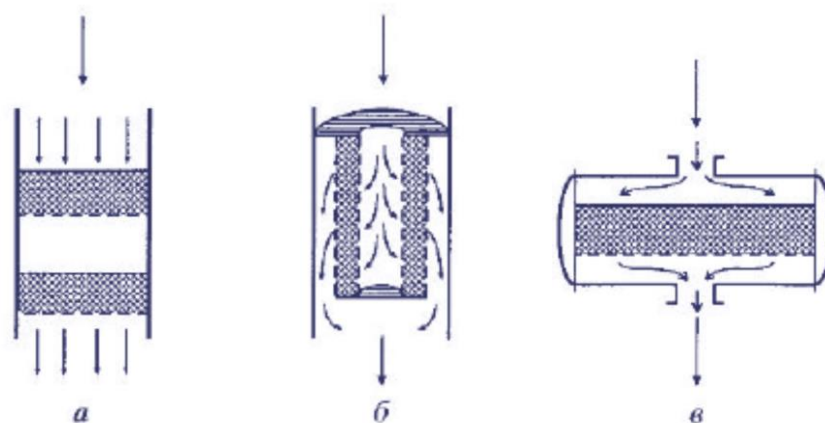


Рис. 26. Схемы реакторов с аксиальным (а) и радиальными (б, в) слоями катализатора

Задача синтеза является многовариантной, т.е. одни и те же значения выходных параметров могут быть обеспечены при различной структуре системы и разных режимах функционирования элементов.

Задача синтеза имеет особенности для проектирования нового производства (ХТС) и для реконструкции существующего. Суть отличий в том, что при создании новой ХТС имеется много возможностей выбора элементов и связей между ними, а при реконструкции ХТС требуется сохранить все или часть ее элементов, а также все или часть связей между элементами.

Использование эволюционного принципа синтеза ХТС позволяет эффективно получить локальные оптимальные результаты, т.к. результат решения в значительной мере определяется принятыми концепциями при разработке исходного варианта топологии ХТС.

КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ

1. Химическое производство. Химико-технологический процесс. Химико-технологическая система. Определения этих понятий. Структура ХТС.
2. Структура и функциональные элементы химического производства.
3. Подсистемы ХТС. Классификация подсистем по двум признакам. Примеры.
4. Показатели эффективности функционирования ХТС.
5. Состояние ХТС. Как его определяют? На чем основан расчет ХТС?
6. Материальный баланс элемента ХТС и ХТС в целом. Принципы составления. Форма представления.
7. Общее уравнение теплового баланса. Принцип расчета. Форма представления. Классификация ХТС по способу функционирования, по назначению. Их преимущества и недостатки. В чем отличие способов функционирования непрерывно-циклических от периодических ХТС? Основные предпосылки для создания гибких ХТС.
8. Общие принципы разработки ХТС. Системный подход в химической технологии. Анализ, синтез и оптимизация как научно-исследовательские операции при разработке ХТС.
9. Описание (модели) ХТС. Классификация моделей ХТС. Их использование.
10. Что отображают функциональная, структурная, технологическая, операторная схемы производства? Приведите примеры химической, функциональной и операторной схем какого-либо производства.
11. Типы связей в ХТС. Их назначение. Примеры.
12. Свойства ХТС как системы. Интерэктность и эмерджентность.
13. Устойчивость, чувствительность, управляемость, надежность ХТС.
14. Анализ ХТС. Определение, цель, задачи.
15. Структурный и функциональный анализ элементов и ХТС в целом. Последовательность анализа.
16. Количественная оценка эффективности использования материальных ресурсов. Теоретический и реальный расходный коэффициент. Степень использования сырья. Привести примеры расчета.
17. Основные причины различия между теоретическими и реальными расходными коэффициентами
18. Энергетическая эффективность ХТС. Тепловой КПД и КПД полной энергии.
19. Эксергетическая эффективность ХТС. Эксергетический КПД. Свойства энергии и эксергии.
20. Энтропийные и неэнтропийные источники энергии. Потери эксергии, их причины.
21. Особенности применения эксергетического метода при анализе ХТС.
22. Эффективность организации процесса в ХТС.
23. Синтез ХТС. Задачи синтеза ХТС.
24. Методы решения задачи синтеза ХТС. Декомпозиционный метод, его сущность.
25. Аналитические и эвристические методы решения задачи синтеза ХТС.
26. Интегральные методы решения задачи синтеза ХТС.
27. Эволюционные (последовательные) методы решения задачи синтеза ХТС. Привести пример.
28. Концепции создания ХТС.
29. Концепция полного использования сырьевых ресурсов. Причины низкой степени использования сырья.
30. Основные приемы для увеличения степени использования сырья: избыток одного из реагентов, противоточный контакт фаз, правильный выбор процесса, фракционный рецикл, регенерация с рециклом, утилизация отходов, альтернативное сырье, комбинирование производств и комплексное использование сырья. В каких случаях они применяются?

31. Минимизация энергетических и тепловых затрат. Внутренние энергетические ресурсы ХТС. Трудности их использования в химических производствах .

32. Основные приемы снижения энергозатрат на единицу выпускаемого целевого продукта и сокращения потерь тепла в окружающую среду: регенерация теплоты, регенерация энергии, утилизация теплоты и энергии, создание энерготехнологических схем, использование альтернативных источников энергии и др.

33. Концепция минимизации отходов химического производства. Решения: санитарная очистка и обезвреживание отходов, замкнутый водооборот, уменьшение вспомогательных потоков, повышение надежности оборудования. Безотходные и малоотходные производства.

34. Концепция эффективного использования оборудования. Интенсификация процесса, улучшение организации процесса, организация технологического процесса в подсистеме ХТС, конструктивные решения аппаратов, увеличение единичной мощности.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Большая сложность современных ХТС, их многомерность как по числу составляющих элементов, так и по числу выполняемых функций, высокая степень взаимосвязанности и взаимовлияния элементов требует при их разработке применения научно обоснованного системного подхода, связанного с использованием сложного математического аппарата.

В данном пособии изложены основы анализа и синтеза ХТС без рассмотрения математических моделей и их описания, которые на начальном этапе изучения дисциплины могут затруднять освоение и применение основополагающих принципов разработки ХТС. Учебное пособие предназначено в помощь студентам при изучении основных представлений о принципах построения ХТС, задачах и методах их расчёта, формировании умений выделения отдельных этапов в решении общих задач анализа и синтеза ХТС, установления взаимосвязей между ними и последовательности их выполнения. Использование студентами данного пособия нацелено на дальнейшее развитие и систематизацию полученных знаний при изучении последующих специальных дисциплин магистерской программы "Химическая технология природных энергоносителей и углеродных материалов" (направление "Химическая технология"), понимание взаимосвязи между этими дисциплинами при решении конкретных профессиональных задач создания ХТС, усовершенствования каких-либо элементов или подсистем ХТС с учётом требований экономической эффективности и безопасности.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Бесков, В.С. Общая химическая технология [Текст]: Учебник для вузов./В.С. Бесков .- М.: ИКЦ «Академкнига», 2005.-452с. 6 ил., табл.- ISBN 5-94628-150-X.
2. Кафаров, В. В. Анализ и синтез химико-технологических систем [Текст]: Учебник для вузов/В.В. Кафаров В. В., В.П. Мешалкин .- М.: Химия, 1991.- 432 с.: ил.- ISBN 5-7245-0366
3. Кутепов, А.М. Общая химическая технология [Текст]: Учебник для техн. вузов / А.М. Кутепов, Т.И.Бондарева, М.Г. Беренгартен. М.: Академкнига, 2004.-528с.: ил. - ISBN 5-94628-079-1.
4. Общая химическая технология. Основные концепции проектирования химико-технологических систем [Текст]: учебник / И. М. Кузнецова [и др.] ; под ред. Х. Э. Харлампики .— 2-е изд., перераб. — Санкт-Петербург : Лань, 2014 .— 384 с. : ил. — ISBN 978-5-8114-1479-6
5. Основы проектирования химических производств: учебник / С. И. Дворецкий, Д. С. Дворецкий, Г. С. Кормильцин, А. А. Пахомов. — Москва: Издательский дом «Спектр», 2014. — 356 с. ISBN 978-5-4442-0069-8.
6. Основы химической технологии [Текст]: учебник для студентов хим.-технол. спец. вузов / под ред. И.П. Мухленова. — Москва : Высшая школа, 1991 . — 463 с. : ил. : (в пер.):02-20.
7. Закгейм, А. Ю. Общая химическая технология. Введение в моделирование химико-технологических процессов[Текст]: учебное пособие / А. Ю. Закгейм . — 3-е изд., перераб. и доп. — М. : Логос, 2009 . — 304 с. — ISBN 978-5-9870428-9-5.
8. Кандауров, Б.П. Общая химическая технология [Текст]: учеб. пособие для студ.высш.учеб.заведений/ Кандауров Б.П., Александров В.И., Артемов А.В.- М.: Издат.центр "Академия", 2005.- 336 с. — ISBN 5-7695-1792-1.
9. Лисицын, Н.В. Теоретические основы энерго- и ресурсосбережения: учебное пособие / Н.В. Лисицын. - СПб.: СПбГТИ(ТУ), 2010. —124 с.
10. Меркер, Э. Э. Энергосбережение в промышленности и эксергетический анализ технологических процессов [Текст]: учеб. пособие.- Старый Оскол: Тонкие наукоемкие технологии, 2014.-316 с. - ISBN 978-5-94178-138-6
11. Натареев, С. В. Системный анализ и математическое моделирование процессов химической технологии [Текст]: учебное пособие . — Иваново : Иван. гос. хим.-технол. ун-т, 2007 -79 с. - ISBN: 5-9616-0204-4.
12. Невский, А. В. Анализ и синтез водных ресурсосберегающих химико-технологических систем [Текст]: учебное пособие/А.В. Невский, В.П. Мешалкин, В.А. Шарнин. — М. : Наука, 2004.-212 с. - ISBN 5-02-033287-9.
13. Общая химическая технология [Текст]: учебное пособие : в 2 ч / К.В. Брянкин, Н.П. Утробин, В.С. Орехов, Т.П. Дьячкова. — Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2006. — Ч. 2. — 172 с. — 150 экз. — ISBN 5-8265-0521-4.
14. Островский, Г. М. Методы оптимизации химико-технологических процессов [Текст]: учеб. пособие /Г. М. Островский, Ю. М. Волин, Н. Н. Зиятдинов.- М.:КДУ, 2008.-423 с.- ISBN 978-5-98227-343-7
15. Островский, Г. М. Оптимизация химико-технологических процессов. Теория и практика [Текст] / Г. М. Островский, Т. А. Бережинский. — М. : Химия, 1984. — 240 с.
16. Смирнов, А.Н. Гетерогенные химические процессы [Электронный ресурс]:учеб. пособие/ А.Н. Смирнов, С.А. Крылова, В.И. Сысоев - ФГБОУ ВПО «МГТУ им. Г.И. Носова» . —Электрон.текстовые дан. (1,18 Мб). -Магнитогорск: ФГБОУ ВПО «МГТУ им. Г.И. Носова», 2016. - 1 электрон. опт. диск (CD-R). — Загл. с титул.экрана.

17. Смирнов, А.Н. Химические реакторы. Гомогенный изотермический процесс [Электронный ресурс]: учеб. пособие/ А.Н. Смирнов, С.А. Крылова, В.И. Сысоев - ФГБОУ ВПО «МГТУ им. Г.И. Носова» . –Электрон.текстовые дан. (1,40 Мб). -Магнитогорск: ФГБОУ ВПО «МГТУ им. Г.И. Носова», 2016. - 1 электрон. опт. диск (CD-R). – Загл. с титул.экрана.

18. Химико-технологические системы. Синтез, оптимизация и управление [Текст]/ Под ред. И.П. Мухленова. - Л., Химия, 1986. - 424 с.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Частные задачи синтеза

Общая формулировка задачи синтеза

1. Синтез оптимальных схем теплообмена

Дано: количество горячих и холодных потоков, начальные и конечные температуры всех потоков, механические и теплофизические характеристики всех потоков.

Определить: схему теплообмена, имеющую минимальные приведенные годовые затраты.

Примеры эвристик (выбор пары потоков)

- количество передаваемого тепла является максимальным;
- заданные конечные температуры потоков не достигнуты, а стоимость использования вспомогательных теплоносителей для доведения температуры этих потоков до заданных конечных значений является минимальной;
- стоимость нагрева (охлаждения) данных потоков вспомогательными теплоносителями является максимальной;
- стоимость теплообмена является минимальной.

Примеры эвристик (выбор горячего и холодного потоков для теплообмена)

- горячий поток с наиболее высокой температурой на входе и холодный поток с наиболее высокой температурой на выходе;
- горячий и холодный потоки с наиболее высокой температурой на входе;
- выбираются те тепловые потоки, для теплообмена между которыми требуется теплообменник с минимальными затратами;
- горячий и холодный потоки выбираются случайным образом.

Примеры эвристик (выбор конструкции теплообменников)

- используются противоточные теплообменники, везде, где это возможно;
- теплообмен проводится до тех пор, пока разность температур не достигнет заданного значения;
- теплообмен прекращается, если достигнута максимально допустимая поверхность теплообмена;
- теплообмен прекращается, если передано максимально возможное количество теплоты;
- теплообмен не проводится, если передаваемое тепло меньше заданного значения;
- теплообменник должен иметь минимальную стоимость при максимальной ремонтпригодности.

2. Синтез оптимальных схем разделения смесей.

Дано: смесь из N веществ со всеми необходимыми характеристиками.

Определить: схему разделения смеси на чистые вещества, имеющую минимальные приведенные годовые затраты.

Примеры эвристик (выбор варианта разделения)

— с последовательным выделением целевых продуктов в виде легких продуктов элементов подсистемы;

— отношение количества верхнего и нижнего продуктов в каждом элементе подсистемы наиболее близко к 1;

— разделение компонентов осуществляется в порядке уменьшения различий в значениях относительных летучестей разделяемых ключевых компонентов;

— ректификационные колонны, требующие наибольших затрат на разделение вследствие близких относительных летучестей ключевых компонентов или высоких требований к чистоте продуктов, должны быть помещены в конце схемы разделения;

— минимальная величина приведенных затрат на реализацию данного технологического процесса в элементе подсистемы и т.д.

Примеры эвристик (выбор реакторных схем)

— замена одного РИС на каскад РИС без изменения общего времени контакта, позволяет достичь большей степени превращения за счет изменения гидродинамической обстановки и уменьшить конструктивный размер каждого реактора. Замена одного РИВ на каскад РИВ позволяет только сократить конструктивный размер каждого реактора;

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

— параллельное подключение дополнительного аппарата позволяет увеличить нагрузку по сырью при сохранении неизменной степени превращения;

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

— последовательное соединение применяют, когда необходимо провести технологический процесс с выделением какого либо компонента после каждой стадии;

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

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

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

— последовательное соединение применяют, когда необходимо провести технологический процесс с выделением какого либо компонента после каждой стадии;

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

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

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

Учебное текстовое электронное издание

Крылова Светлана Александровна

**ВВЕДЕНИЕ В АНАЛИЗ И СИНТЕЗ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Учебное пособие

1,60 Мб

1 электрон. опт. диск

г. Магнитогорск, 2016 год

ФГБОУ ВО «МГТУ им. Г.И. Носова»

Адрес: 455000, Россия, Челябинская область, г. Магнитогорск,
пр. Ленина 38

ФГБОУ ВО «Магнитогорский государственный
технический университет им. Г.И. Носова»

Кафедра физической химии и химической технологии

Центр электронных образовательных ресурсов и

дистанционных образовательных технологий

e-mail: ceor_dot@mail.ru