

# **Звіт по магістерській роботі**

**Тема:** «Визначення індикаторів сталого розвитку з використанням сучасних програмних комплексів»

**Виконав:**  
магістрант VI курсу  
ХТФ, гр. ХА-61  
Задорожний А.С.  
**Науковий керівник:**  
Бугаєва Л.М.

**Київ 2011**

# Алгоритм WAR (WASTE REDUCTION algorithm)

WAR алгоритм враховує ймовірність різних впливів на навколишнє середовище, потенційний вплив на навколишнє середовище (PEI), який можуть викликати хімічні речовини, що використовуються і виробляються в результаті хімічного процесу. Реакції, які перетворюють хімічні речовини з менш екологічно шкідливих в більш екологічно шкідливі призводять до збільшення PEI, пов'язаних з процесом.

WAR вважається одновимірним показника стійкості, оскільки він розглядає тільки екологічні аспекти хімічного процесу.

# ТИПИ ВПЛИВІВ НА НАВКОЛИШНЄ середовище, які оцінюються

**WAR**

Загальна категорія впливу	Категорія впливу	Категорія ступеня впливу
На людей	Продукти харчування	Летальна доза (50%) – LD50
	Шкіряний покрив/ дихальні шляхи	OSHA
На природу	Забруднення води	Летальна концентрація – LC50
	Забруднення ґрунту	LD50
Глобальний вплив на атмосферу	Глобальне потепління	GWP
	Виснаження озонового шару	ODP
Регіональний атмосферний вплив	Кислотні дощі	AP
	Формування смогу	PCOP

OSHA – допустимі межі впливу, встановлені Міністерством охорони здоров'я США.

# Математична модель WAR

- $\frac{dI_{syst}}{dt} = \dot{I}_{in} - \dot{I}_{out} + \dot{I}_{gen}$
- $\dot{I}_{in} = \sum_i^{EnvCat} \sum_j^{Inlet\ Streams} \sum_k^{Component} \alpha_i \dot{M}_j^{(in)} x_{k,j} \psi_{k,i}^S$
- $\dot{I}_{out} = \sum_i^{EnvCat} \sum_j^{Outlet\ Streams} \sum_k^{Component} \alpha_i \dot{M}_j^{(out)} x_{k,j} \psi_{k,i}^S$

де  $I_{syst}$  виражає потенційний екологічний вплив всередині процесу,  $I_{in}$  показує ступінь потенційного впливу на вході,  $I_{out}$  показує ступінь потенційного впливу на виході, а також  $I_{gen}$  є ступінь, з яким вплив утворюється в системі, в результаті хімічних реакцій.

# Програми для оцінки сталості ХТС

## Вільне ПЗ (за стандартом CAPE-OPEN):

- COFE (ver. 2.3.1);
- WAR GUI (ver. 1.0.17);
- Advanced Process Analysis System (ver. 1.0.0);

## Комерційне ПЗ:

- HYSYS 2006 + gPROMS + ENVOPExpert
- ChemCAD 6.3.1 + WAR Module;

# Використання WAR в COFE

The screenshot displays the COFE software interface with a process flowsheet and a 'Select Add-in' dialog box. The dialog box is open, showing a list of add-ins: 'Mixers & Splitters', 'TERNYP: Ternary Plugin', and 'WAR Add-In'. The 'WAR Add-In' is selected, and the 'Select' button is circled in red. A red arrow points to the 'WAR Add-In' entry. The flowsheet includes components like 'Feed pump', 'Reactor quench', 'Main HEX', 'Flash cooler', 'Flash', 'Demethanizer', and 'Toluene recovery'. A data table is located at the bottom of the interface.

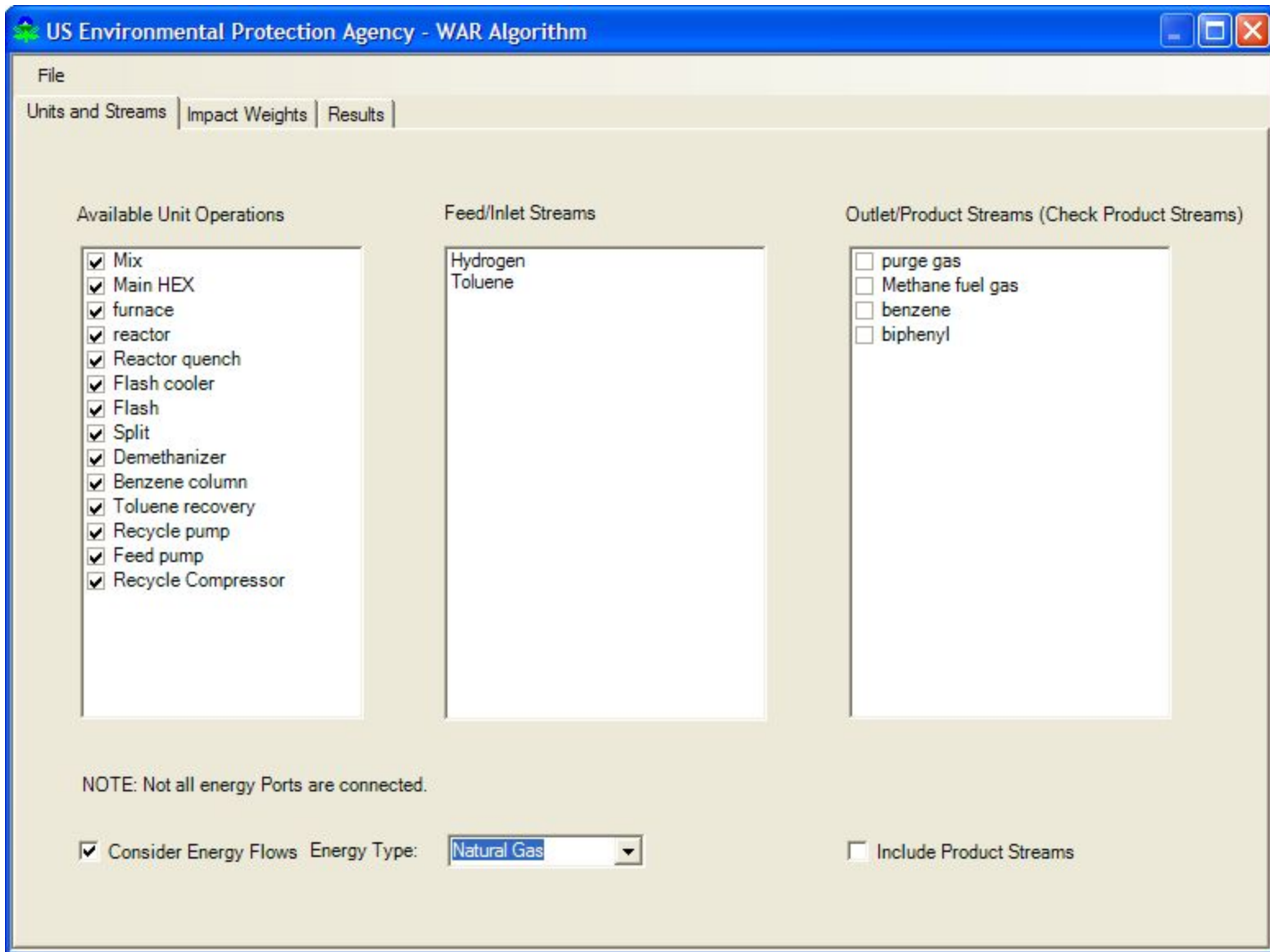
Stream	Hydrogen	Toluene	purge gas	Methane fuel gas	benzene	biphenyl	Unit
Pressure	38.3	1	32.8	10	1	1	bar
Temperature	38	25	38	38.6688	79.7269	241.369	°C
Flow rate	909.978	15387.5	3287.95	196.091	12392.5	421.018	kg / h
Mass frac Hydrogen	0.7	0	0.0926999	0.00832077	0	0	
Mass frac Methane	0.3	0	0.844697	0.865015	0	0	
Mass frac Benzene	0	0	0.0552264	0.126654	0.999938	3.27013e-011	
Mass frac Toluene	0	1	0.00737562	1.01007e-005	6.23028e-005	0.0117736	
Mass frac Biphenyl	0	0	1.59434e-006	0	0	0.988226	

Restoring flowsheet from file  
Loaded HDA.fsd

Log Solved, 6 warnings

Load a new Add-in

# Використання WAR в COFE



# Використання WAR в COFE

US Environmental Protection Agency - WAR Algorithm

File | Units and Streams | **Impact Weights** | Results

Impact Category	User Assigned Weight
Human Toxicity: Ingestion	1.0
Human Toxicity: Dermal/Inhalation	1.0
Aquatic Toxicity	1.0
Terrestrial Toxicity	1.0
Global Warming	1.0
Ozone depletion	1.0
Photochemical Oxidation	1.0
Acidification	1.0



# Використання WAR в COFE

US Environmental Protection Agency - WAR Algorithm

File

Units and Streams | Impact Weights | Results

Iout PEI/hour	Iout PEI/kg	Igen PEI/hour	Igen PEI/kg	Ie
6.328E+003	N/A	-1.574E+004	N/A	0.

Individual impact categories

Total output rate of PEI (PEI/hour)

HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
1.48E+003	1.94E+002	1.48E+003	2.70E+002	1.65E+001	0.00E+000	2.

Total PEI leaving the system per mass of products (PEI/kg product)

HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/

Total generation rate of PEI (PEI/hour)

HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
3.25E+002	1.89E+002	3.25E+002	9.63E+001	1.50E+001	0.00E+000	-1

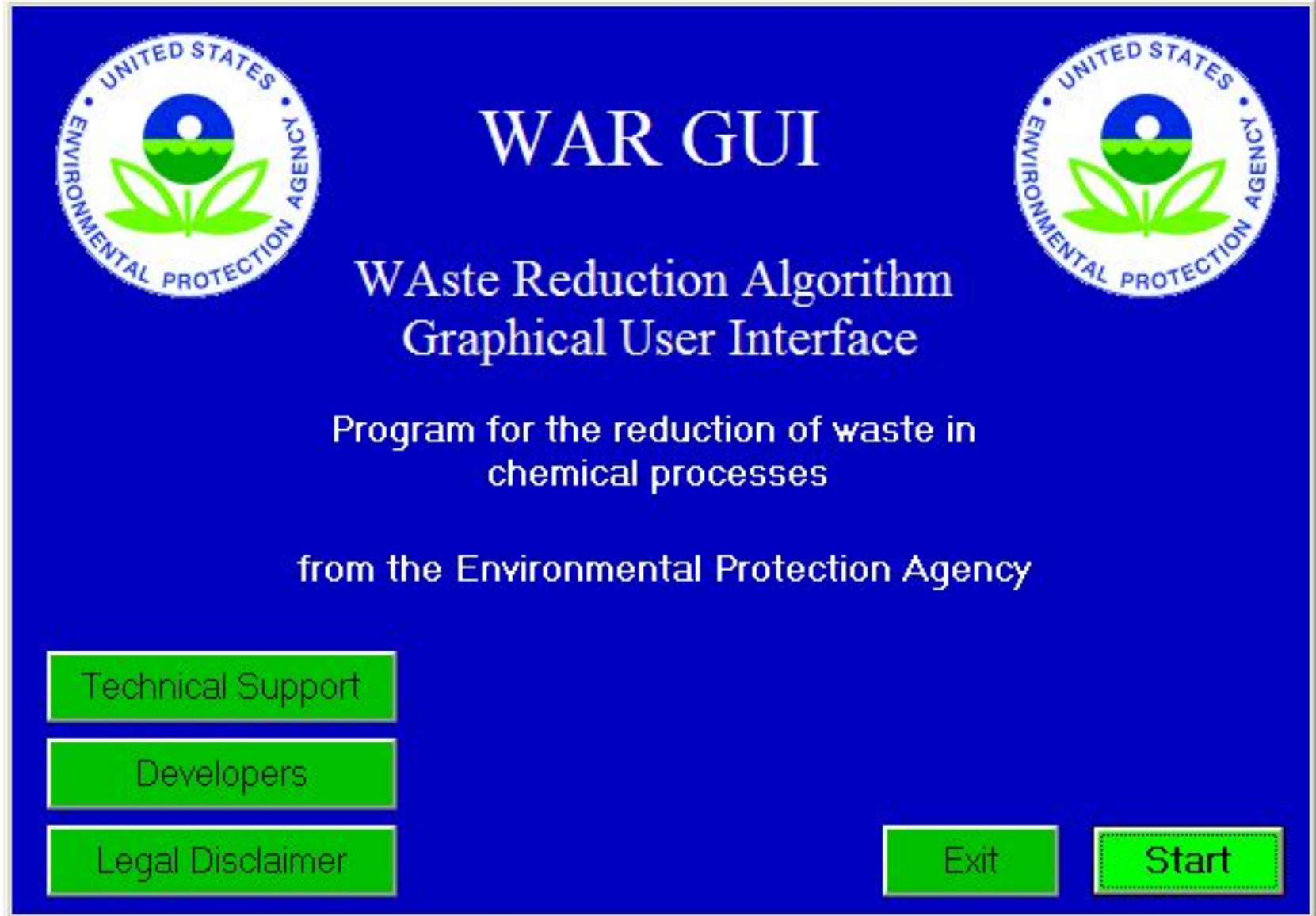
Total PEI generated within a system per mass of products (PEI/kg product)

HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/

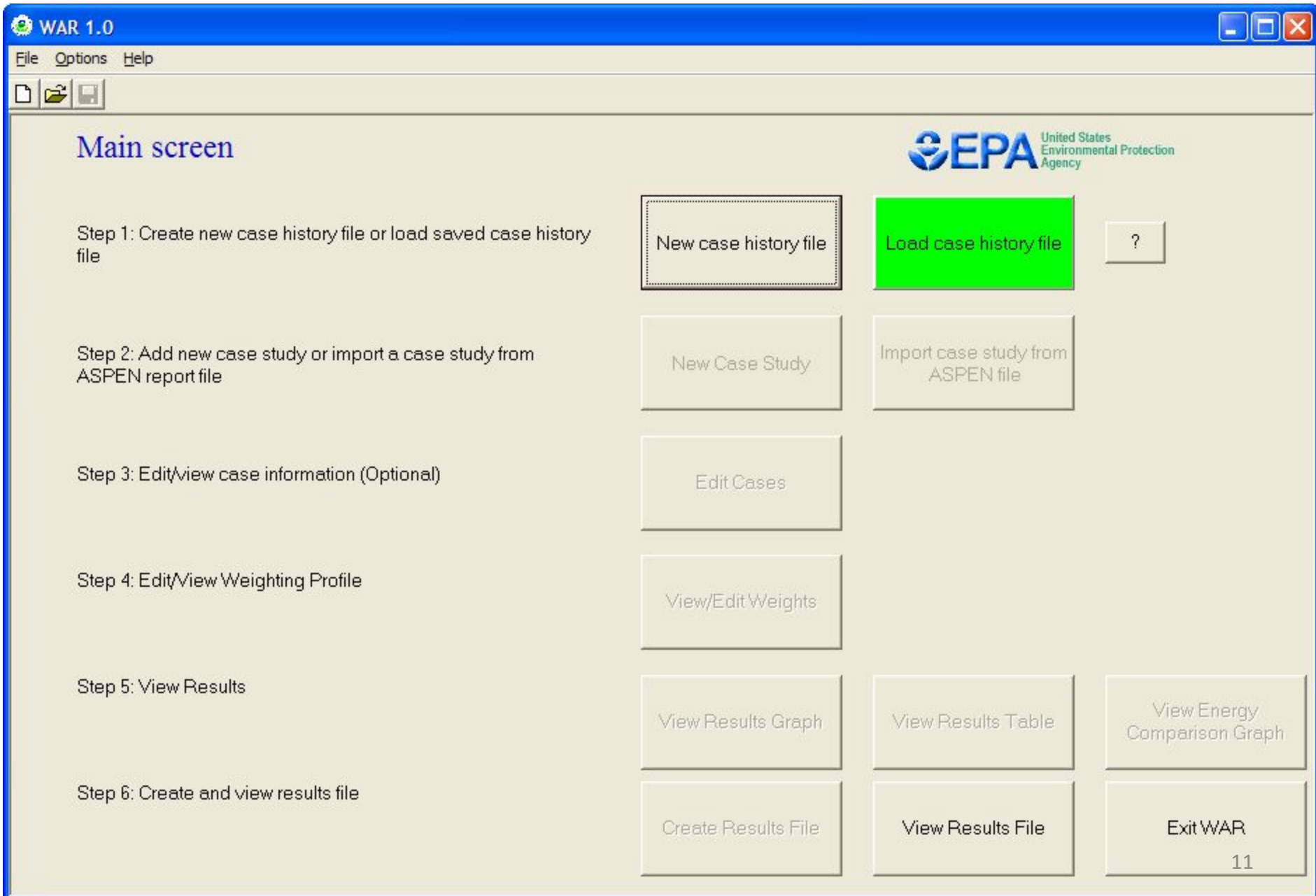
Output rate of PEI from energy usage (PEI/hour)

HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
0.00E+000	0.00E+000	0.00E+000	0.00E+000	0.00E+000	0.00E+000	0.

# Використання WAR GUI



# Використання WAR GUI



# Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR

File Help


## ASPEN components screen

Instructions: double click on the red chemical name fields to select the desired chemicals

Note: If only one compound in the database matches the formula in the ASPEN file, the name and CAS # will be automatically filled in.

Aspen component list

ID	Type	Formula	Name	ReportName	Chemical Name
NAPHT-01	C	C10H8	C10H8	NAPHT-01	NAPHTHALENE
PHTHA-01	C	C8H4O3	C8H4O3	PHTHA-01	PHTHALIC ANHYDRIDE
MALEI-01	C	C4H2O3	C4H2O3	MALEI-01	MALEIC ANHYDRIDE
NAPHQ-02	C	C10H6O2	C10H6O2	NAPHQ-02	
CARBO-01	C	CO2	CO2	CARBO-01	CARBON DIOXIDE
CARBO-02	C	CO	CO	CARBO-02	CARBON MONOXIDE
OXYGE-01	C	O2	O2	OXYGE-01	OXYGEN
NITRO-01	C	N2	N2	NITRO-01	NITROGEN
WATER	C	H2O	H2O	WATER	WATER

 United States Environmental Protection Agency

Delete chemical Cancel Finish

12

# Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR

File Help

## Look up formula screen


Aspen Component Descriptors

ID	NAPHQ-02
Type	C
Formula	C10H6O2
Name	C10H6O2
Report Name	NAPHQ-02

Chemicals with formula of

Name

Assign ASPEN ID to highlighted chemical in list above



United States Environmental Protection Agency


13

# Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR

File Help

## Add from user data screen



Chemical Data

Name:  CAS#:

Formula:  Molecular weight:  gm/mol

Impact category data

	Impact Value		Normalized Score
Rat Oral LD50 (HTPI and TTP):	<input type="text"/>	mg/kg	<input type="text"/>
OSHA TWA PEL (HTPE):	<input type="text"/>	mg/m <sup>3</sup>	<input type="text"/>
Fathead Minnow LC50 (ATP):	<input type="text"/>	mg/L	<input type="text"/>
Global Warming Potential (GWP):	<input type="text"/>		<input type="text"/>
Ozone Depletion Potential (ODP):	<input type="text"/>		<input type="text"/>
Photochemical Oxidation Potential (PCOP):	<input type="text"/>		<input type="text"/>
Acidification Potential (AP):	<input type="text"/>		<input type="text"/>

Calculate Scores

Cancel

Add

# Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR

File Help

## Impact weights screen

Potential Environmental Impact (Impact/kg)	User Assigned Weight
Human Toxicity: Ingestion	low [Slider] high
Human Toxicity: Dermal/Inhalation	[Slider]
Aquatic Toxicity	[Slider]
Terrestrial Toxicity	[Slider]
Global Warming	[Slider]
Ozone depletion	[Slider]
Photochemical Oxidation	[Slider]
Acidification	[Slider]

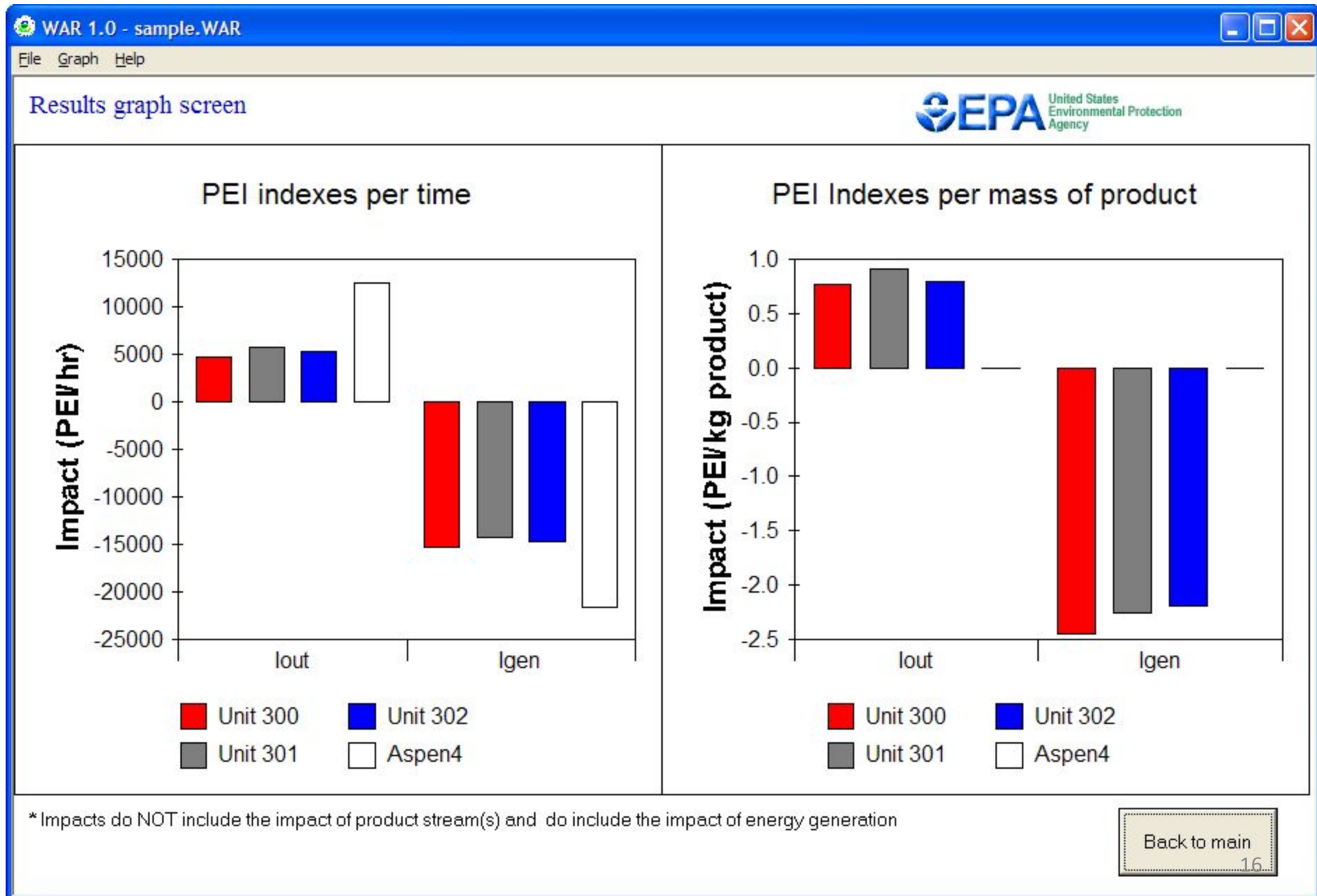
Default Values

Cancel

OK

**EPA** United States Environmental Protection Agency

# Використання WAR GUI





# Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR

File Table Help

Results table screen



## Total PEI indexes\*

Case	lout PEI/hr	lout PEI/kg	lgen PEI/hr	lgen PEI/kg	lenergy PEI/kg	lenergy PEI/kg
Unit 300	4.768E+3	7.645E-1	-1.527E+4	-2.448E+0	1.702E+3	2.728E-1
Unit 301	5.733E+3	9.067E-1	-1.430E+4	-2.262E+0	1.814E+3	2.869E-1
Unit 302	5.342E+3	7.995E-1	-1.469E+4	-2.199E+0	1.919E+3	2.873E-1
Aspen4	1.251E+4	N/A	-2.168E+4	N/A	0.000E+0	N/A

\* Impacts do NOT include the impact of product stream(s) and do include the impact of energy generation

OK

# Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR - [C:\Program Files\WAR GUI\MyFiles\sample.txt]

File Edit Results File Help

## Results file screen

Unit 302 5.342E+3 7.995E-1 -1.469E+4 -2.199E+0 1.919E+3 2.873E-1

Individual impact categories

Total output rate of PEI (PEI/hr)

Case	HTPI	HIPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PCOP	AP	TOTAL
Unit 300	1.60E+02	1.26E+01	1.60E+02	7.36E+01	5.02E+01	5.24E-04	2.77E+03	1.54E+03	4.77E+03
Unit 301	9.80E+01	7.47E+00	9.80E+01	7.63E+01	5.34E+01	5.58E-04	3.76E+03	1.64E+03	5.73E+03
Unit 302	8.06E+01	5.78E+00	8.06E+01	7.97E+01	5.64E+01	5.91E-04	3.30E+03	1.74E+03	5.34E+03

Total PEI leaving the system per mass of products (PEI/kg product)

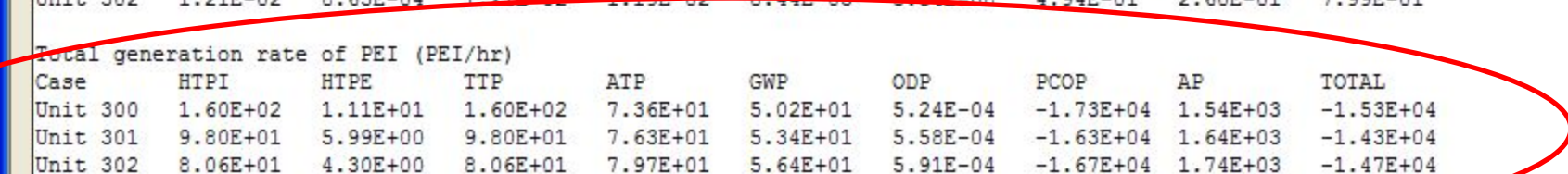
Case	HTPI	HIPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PCOP	AP	TOTAL
Unit 300	2.57E-02	2.02E-03	2.57E-02	1.18E-02	8.05E-03	8.40E-08	4.44E-01	2.47E-01	7.65E-01
Unit 301	1.55E-02	1.18E-03	1.55E-02	1.21E-02	8.44E-03	8.83E-08	5.94E-01	2.60E-01	9.07E-01
Unit 302	1.21E-02	8.65E-04	1.21E-02	1.19E-02	8.44E-03	8.84E-08	4.94E-01	2.60E-01	7.99E-01

Total generation rate of PEI (PEI/hr)

Case	HTPI	HIPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PCOP	AP	TOTAL
Unit 300	1.60E+02	1.11E+01	1.60E+02	7.36E+01	5.02E+01	5.24E-04	-1.73E+04	1.54E+03	-1.53E+04
Unit 301	9.80E+01	5.99E+00	9.80E+01	7.63E+01	5.34E+01	5.58E-04	-1.63E+04	1.64E+03	-1.43E+04
Unit 302	8.06E+01	4.30E+00	8.06E+01	7.97E+01	5.64E+01	5.91E-04	-1.67E+04	1.74E+03	-1.47E+04

Total PEI generated within a system per mass of products (PEI/kg product)

Case	HTPI	HIPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PCOP	AP	TOTAL
Unit 300	2.57E-02	1.79E-03	2.57E-02	1.18E-02	8.05E-03	8.40E-08	-2.77E+00	2.47E-01	-2.45E+00
Unit 301	1.55E-02	9.47E-04	1.55E-02	1.21E-02	8.44E-03	8.83E-08	-2.57E+00	2.60E-01	-2.26E+00
Unit 302	1.21E-02	6.43E-04	1.21E-02	1.19E-02	8.44E-03	8.84E-08	-2.50E+00	2.60E-01	-2.20E+00

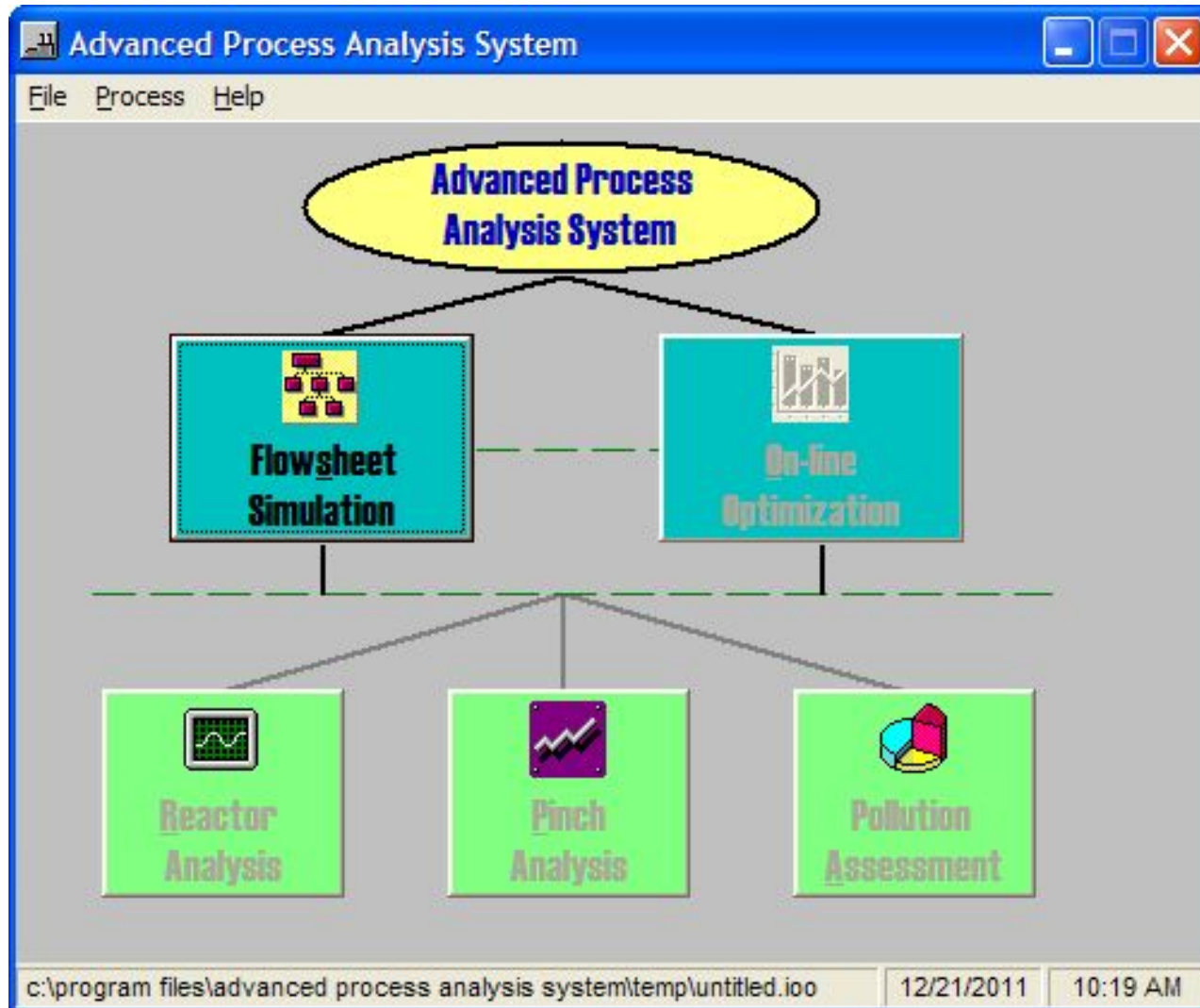


EPA United States Environmental Protection Agency

Close

10

# Використання WAR в Advanced Process Analysis System



# Використання WAR в Advanced Process Analysis System

Pollution Index Program - [Process]

Process Help

### Stream List

Stream Name	Total Flowrate	Type
AC02	0.16	Input
AC45	0.16	Non-Product
C320	0.0415	Product
C328	0.05336	Product

Add Stream to list    Update Stream Information    Delete Stream

Stream Name:

Specify:  Flowrates of Components     Mass/Mole Fractions for Components

### Components Data

Component Name	Mass/Mole Fraction
1	0.09271
3	0.80185
4	0.09674
5	0.00534

Total Flowrate:

Stream Type:

**Proceed**

### Variables

Name	Description
FAC34	Total Mass Flowrate
FAC45	Acid Flowrate
FC308	Mass Flowrate
FC316	Total Mass Flowrate
FC320	Total Mass Flowrate
FC322	Total Mass Flowrate

Value =

Search:

Show:  data only for the current stream     all data

Load Data into Total Flow rate for stream

Load Data into Mass/Mole Fraction for Component

# Використання WAR в Advanced Process Analysis System

Pollution Index Program - [Components]

Process Help

Choose Component

- 1
- 11
- 12
- 2
- 3

Relative Weighting Factors (R.W.F.)

Impact Type	R.W.F.
Acidification	1
Ecotoxicity Effect(Aquatic)	1
Ecotoxicity Effect(Terrestrial)	1
Greenhouse Enhancement	1
Human Toxicity Effect(Air)	1

Specific Environmental Impact Potentials ( S.E.I.P.)

For Component 11 :

Impact Type	S.E.I.P.
Acidification	0
Ecotoxicity Effect(Aquatic)	0.017
Ecotoxicity Effect(Terrestrial)	0.164
Greenhouse Enhancement	0
Human Toxicity Effect(Air)	0.295
Human Toxicity Effect(Soil)	0.164
Human Toxicity Effect(Water)	0.164
Ozone Depletion	0
Photochemical Oxidant Formation	0

Calculate Indices

Back to Stream Data

# Використання WAR в Advanced Process Analysis System

**Pollution Index Program - [Index Calculations]**

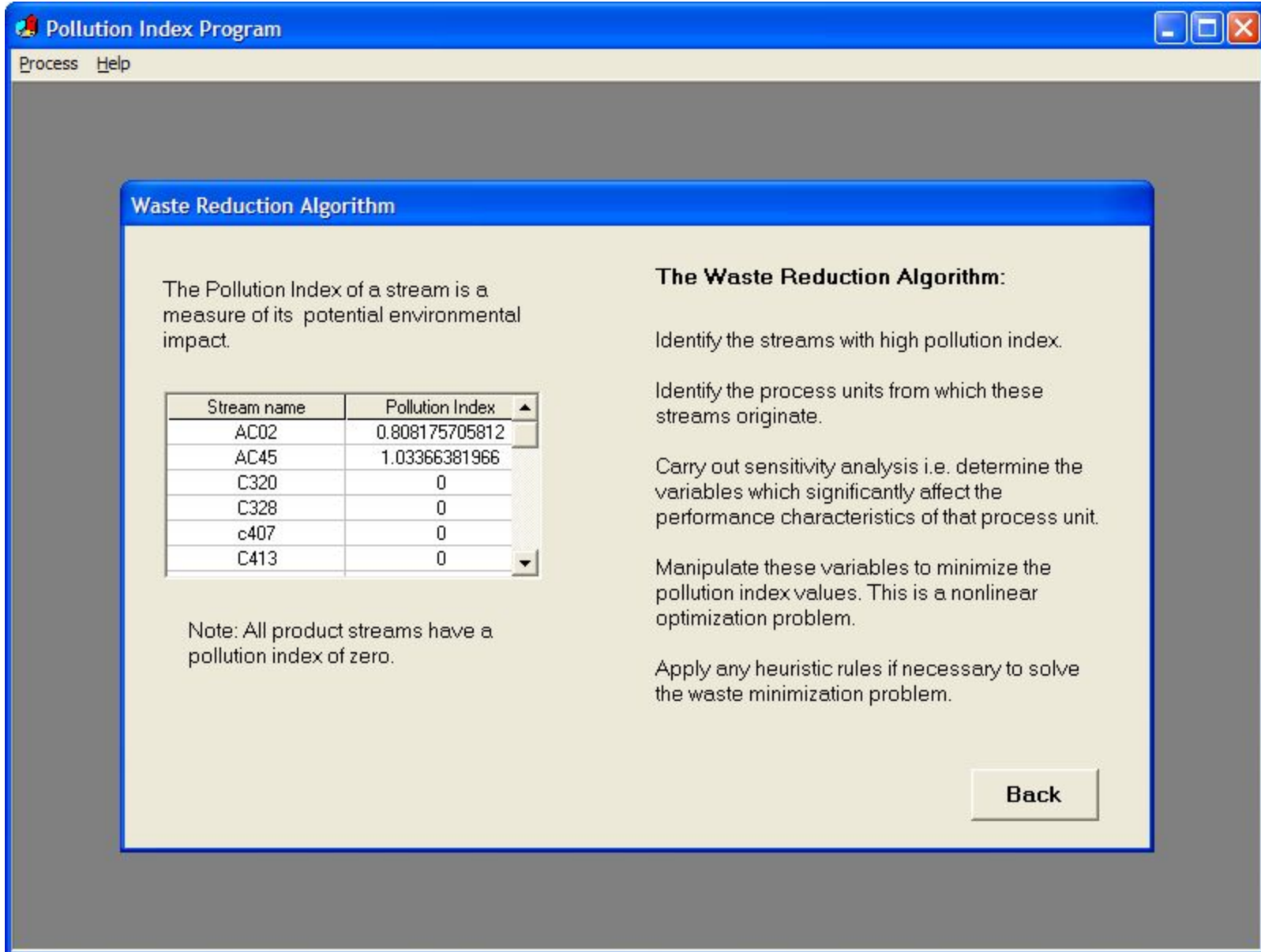
Process Help

Indices based on Generation of Potential Environmental Impact	Indices based on Emission of Potential Environmental Impact
<b>Total rate of Impact Generation</b>	<b>Total rate of Impact Emission</b>
-4.7965597610 Impact / Time Help	1.03366381966 Impact / Time Help
<b>Specific Impact Generation</b>	<b>Specific Impact Emission</b>
-3.4584506284 Impact / Product Help	0.74529985338 Impact / Product Help
<b>Rate of Generation of Pollutants per unit product</b>	<b>Rate of Emission of Pollutants per unit product</b>
-0.9742521144 Mass Pollutants / Mass of products Help	0.11536437115 Mass Pollutants / Mass of products Help

Show WAR algorithm

Back to Stream Data

# Використання WAR в Advanced Process Analysis System



The screenshot shows a window titled "Pollution Index Program" with a menu bar containing "Process" and "Help". The main content area is titled "Waste Reduction Algorithm".

The Pollution Index of a stream is a measure of its potential environmental impact.

Stream name	Pollution Index
AC02	0.808175705812
AC45	1.03366381966
C320	0
C328	0
c407	0
C413	0

Note: All product streams have a pollution index of zero.

**The Waste Reduction Algorithm:**

- Identify the streams with high pollution index.
- Identify the process units from which these streams originate.
- Carry out sensitivity analysis i.e. determine the variables which significantly affect the performance characteristics of that process unit.
- Manipulate these variables to minimize the pollution index values. This is a nonlinear optimization problem.
- Apply any heuristic rules if necessary to solve the waste minimization problem.

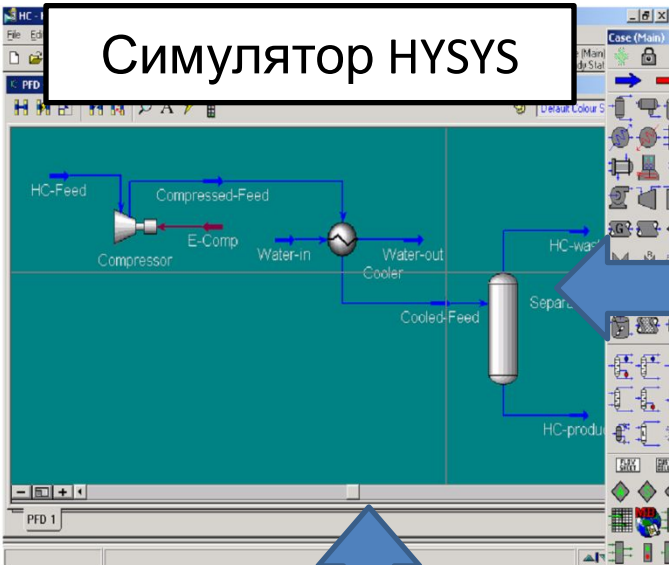
[Back](#)

# Використання WAR в HYSYS 2006 + gPROMS + ENVOPEExpert

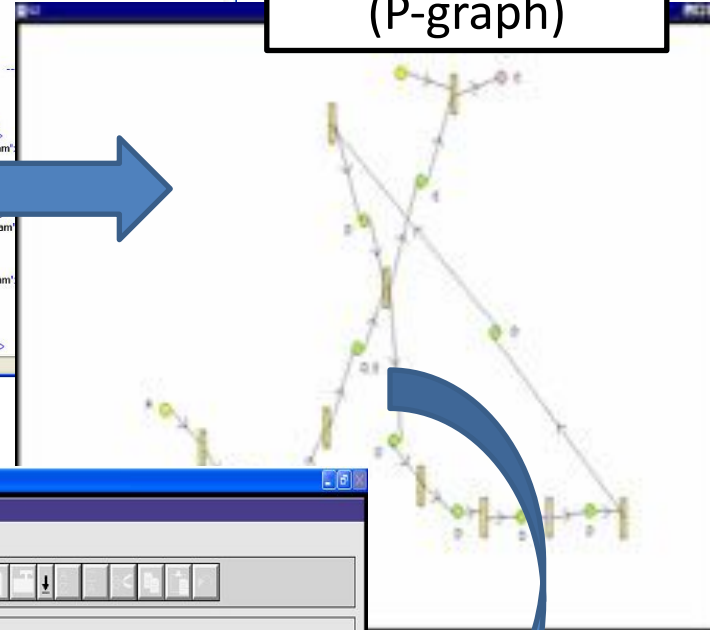
Симулятор HYSYS

XML документ

Process graph  
(P-graph)



```
<?xml version="1.0" ?>
- CaseDefinition:
  - CaseDescription:
    - DocumentType:HYSYS XML</DocumentType>
    - XmlRecallVersion:2.0</XmlRecallVersion>
    - CaseAuthor:HYSYS v9.1</CaseAuthor>
    - BuildNumber:4815</BuildNumber>
    - CaseName:HC</CaseName>
    - CaseMode:SteadyState</CaseMode>
    - GenerationDate:Wed Aug 10 12:32:02 2005</GenerationDate>
    - HYSYS generates a full file, but will also read back partial files.
    - Note: IncrementType must be set for a file to be recognized. -->
  - Description:
  - ABIE:
    - ComponentLists OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
    - ComponentList OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
    - ComponentListName OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
    - Value:Component List - 1</Value>
    - Status:Specified</Status>
    - ComponentListName:
    - Components OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
    - Component OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
    - ComponentName OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
    - Value:Methane</Value>
    - Status:Specified</Status>
    - ComponentName:
    - ComponentType OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
    - Value:PureCompObject</Value>
    - Status:Specified</Status>
    - ComponentType:
    - Component:
    - Component OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet">
```



Microsoft Excel - Hysys Portable

gensym

Establish Connection G2-Hysys

Component	Status	PEI	In/Out Stream	Status	Cost
11 Methane	useful	0.0408	HC-feed	feed	0
12 Ethane	useful	0.1735	Water-in	utility	0.25
13 Propane	useful	0.8528	HC-product	product	25
14 i-Butane	useful	1.472	HC-waste	waste	0
15 n-Butane	useful	1.269	Water-out	utility	0
16 i-Pentane	useful	1.419	E-Comp	energy	0.05

Матеріальні потоки, їх склад, вартість та вплив на навколишнє середовище

Waste Minimization Solution for REACTOR

- HEAT-REACTOR more effectively inside REACTOR to fully convert useful material
- Use alternative separation technology to avoid useful material becoming waste
- Use further separation process after SETTLE-REACTOR CONTENT in REACTOR to avoid useful material from becoming waste
- Improve the design, operation and control of REACTOR for more effective separation
- Change from homogeneous catalyst to heterogeneous type
- Optimize the operating conditions, feed addition and distribution and mixing to avoid useful material from becoming waste
- Change the catalyst to avoid forming useless material
- Consider using reaction-agent to suppress forming useless material
- Consider alternative process chemistry to avoid forming useless material

OK Apply

Евристичний пошук рішення



# Евристичний пошук рішення

- Логічні (якщо-то (if-then)) правила для мінімізації шкідливих викидів під час виробництва.

IF (джерело)	THEN (рішення)
Корисні речовини в потоці відходів	Повторна переробка/рециркуляція
Непотрібні речовини у вхідному потоці	Очищення
Корисні речовини з низьким ступенем регенерації	Збільшення реакції перетворення
Вироблений продукт являється непотрібним	Встановлення оптимальних умов реакції або зміна хімічного процесу
Потрібні речовини у вхідному потоці введення	Зменшення подачі сировини
Неефективний процес реалізації	Докращення умов провіду

- Пошук рішення може бути введений до ривня зміни, як використовуються в програмі-симуляторі

# ВИСНОВКИ

- Розглянута можливість використання основних симуляторів для оцінювання сталості ХТС;
- Для оцінювання сталості використовуються індекси за EPA (Агентство охорони навколишнього середовища США) та алгоритм **WAR (Waste Reduction alorythm)**;

**Дякую за увагу!**