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 грунту	LD50
Гглобальний вплив на атмосферу	Глобальне потепління	GWP
	Виснаження озонового шару	ODP
Регіональний атмосферний вплив	Кислотні дощі	AP
	Формування смогу	PCOP

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

Математична модельWAR

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

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

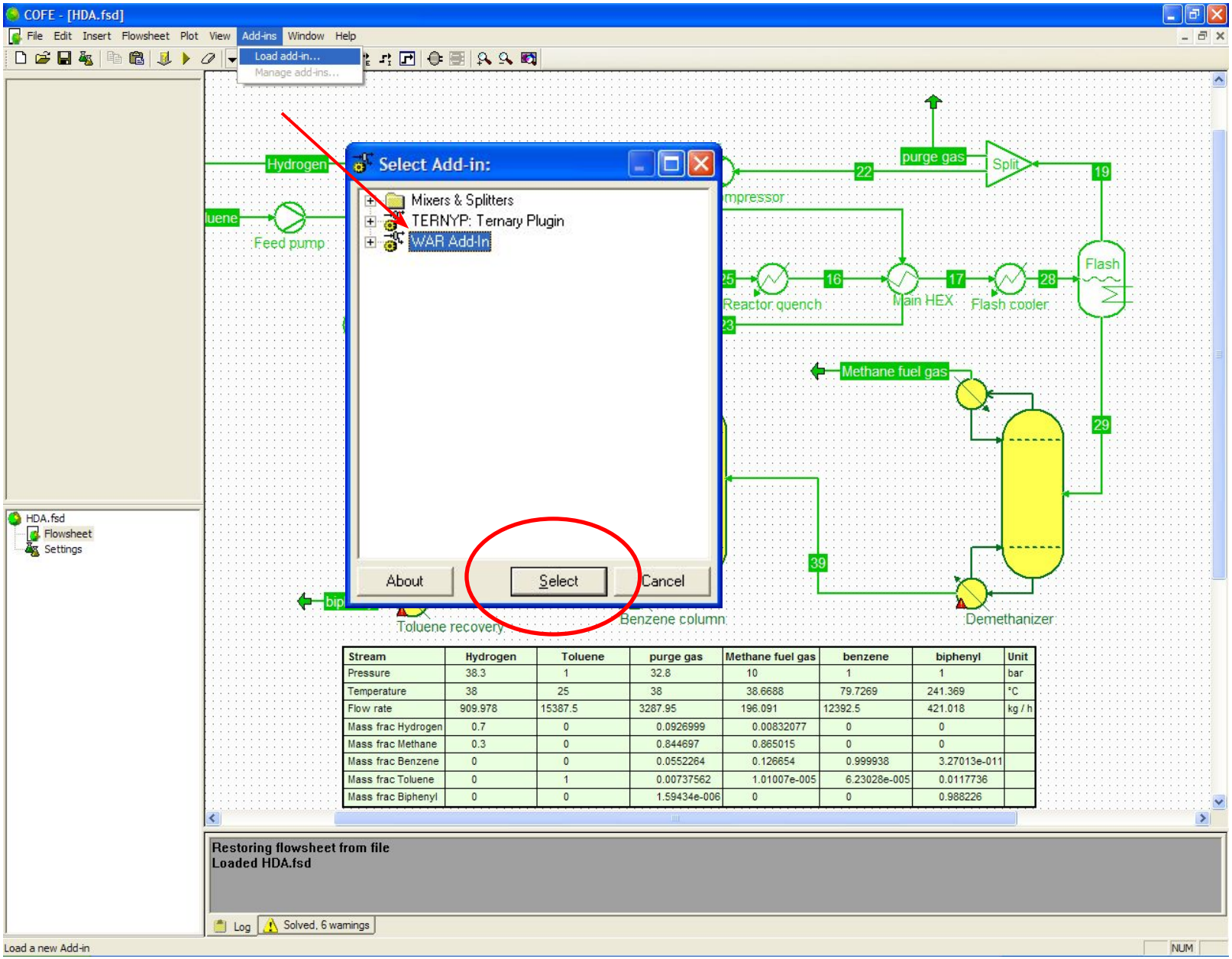
Вільне ПЗ (за стандартом CAPE-OPEN):

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

Комерційне ПЗ:

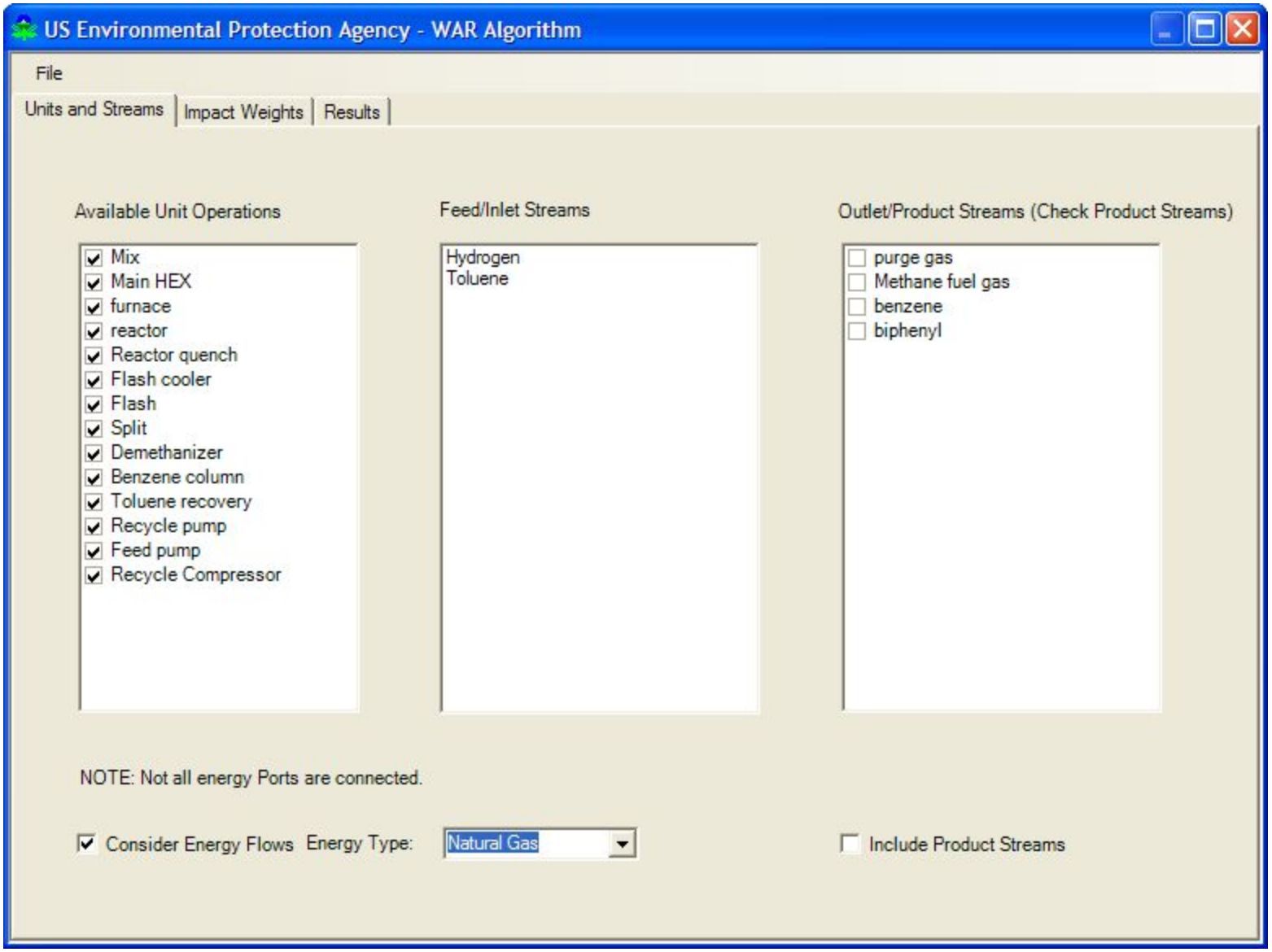
- HYSYS 2006 + gPROMS + ENVOPExpert
- ChemCAD 6.3.1 + WAR Module;

Використання WAR в COFE

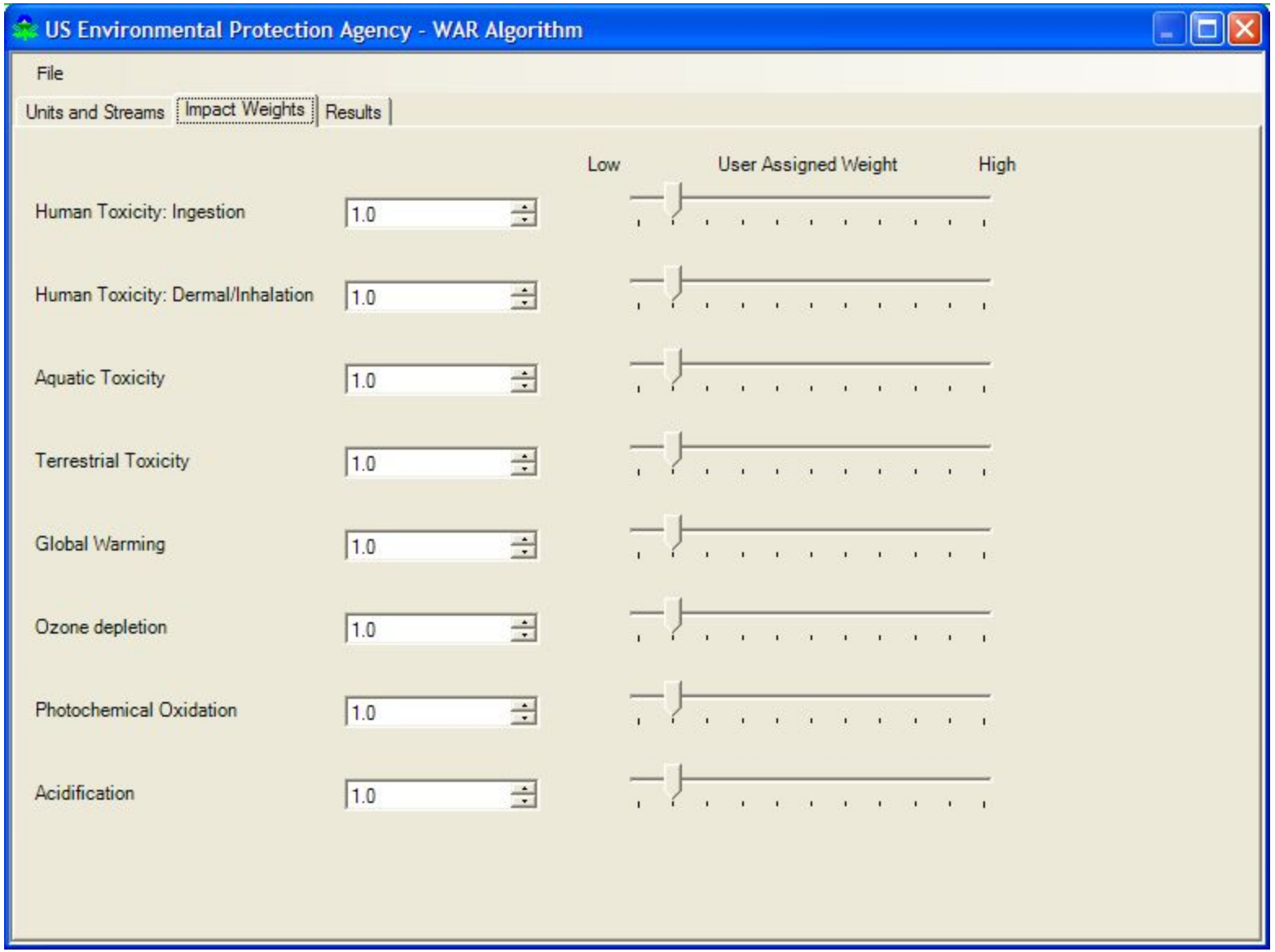


Stream	Hydrogen	Toluene	purge gas	Methane fuel gas	benzene	biphenyl	Unit
Pressure	38.3	1	32.8	10	1	1	bar
Temperature	38	25	38	38.6688	79.7269	241.369	°C
Flow rate	909.978	15387.5	3287.95	196.091	12392.5	421.018	kg / h
Mass frac Hydrogen	0.7	0	0.0926999	0.00832077	0	0	
Mass frac Methane	0.3	0	0.844697	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	

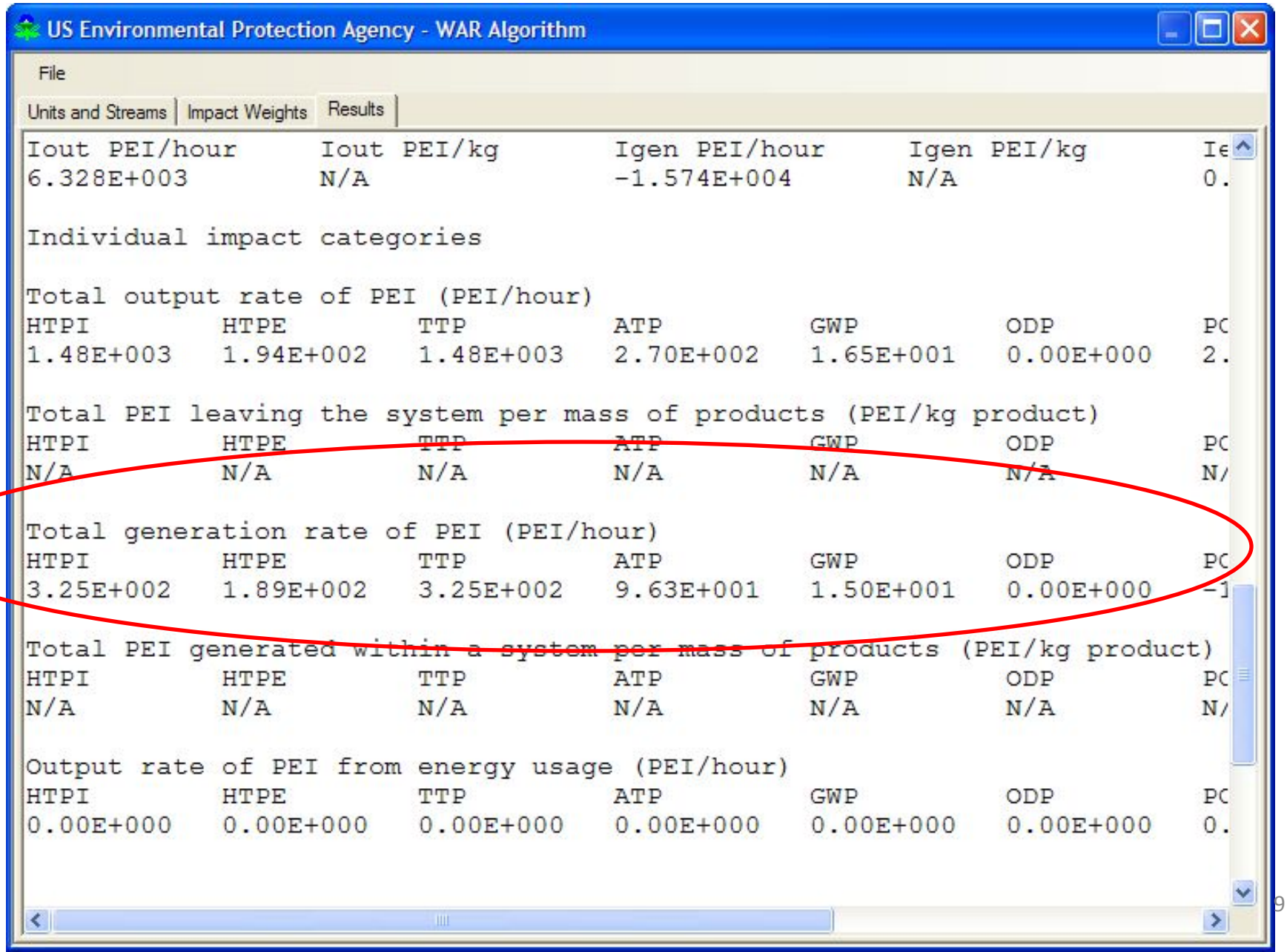
Використання WAR в COFE



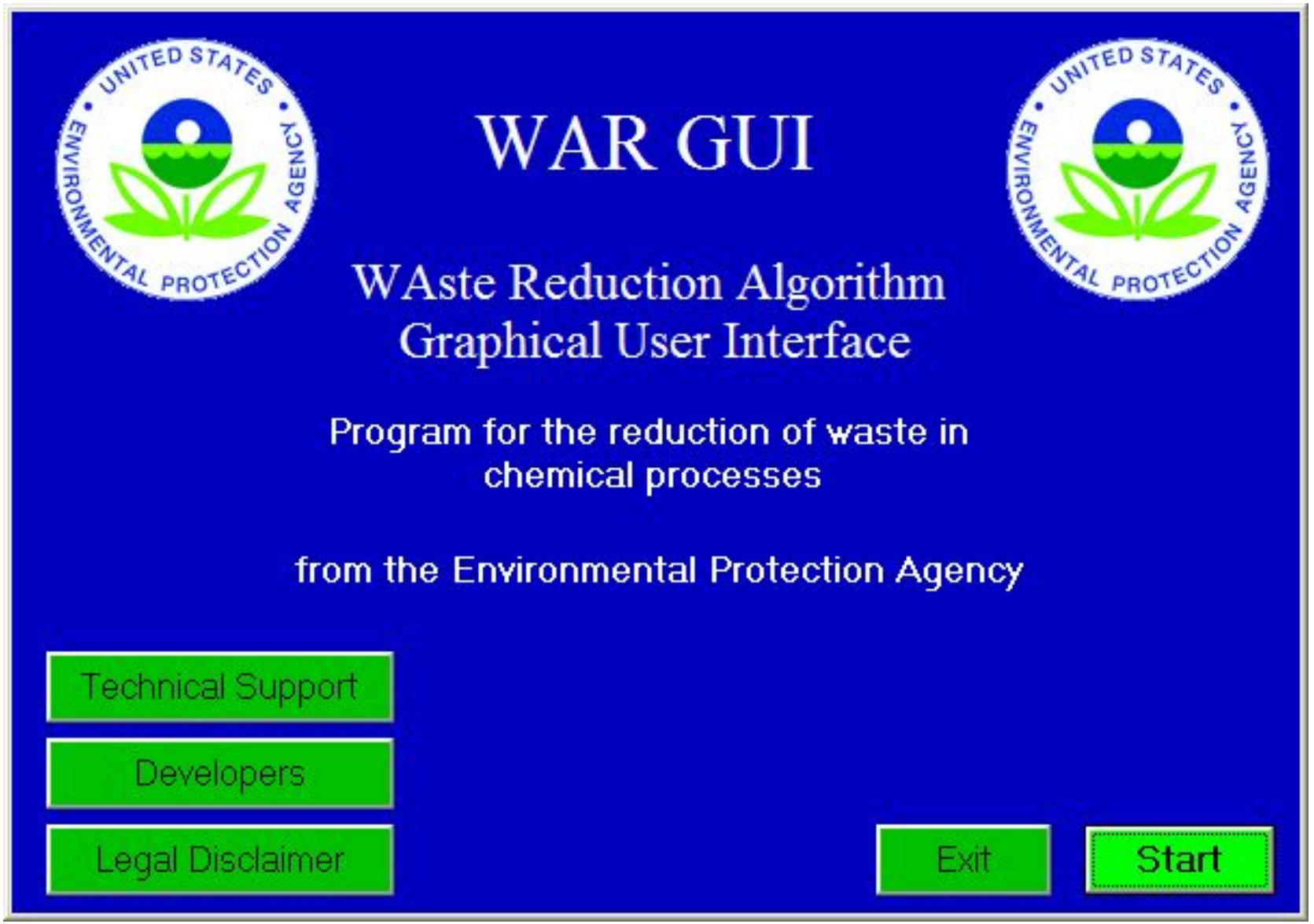
Використання WAR в COFE



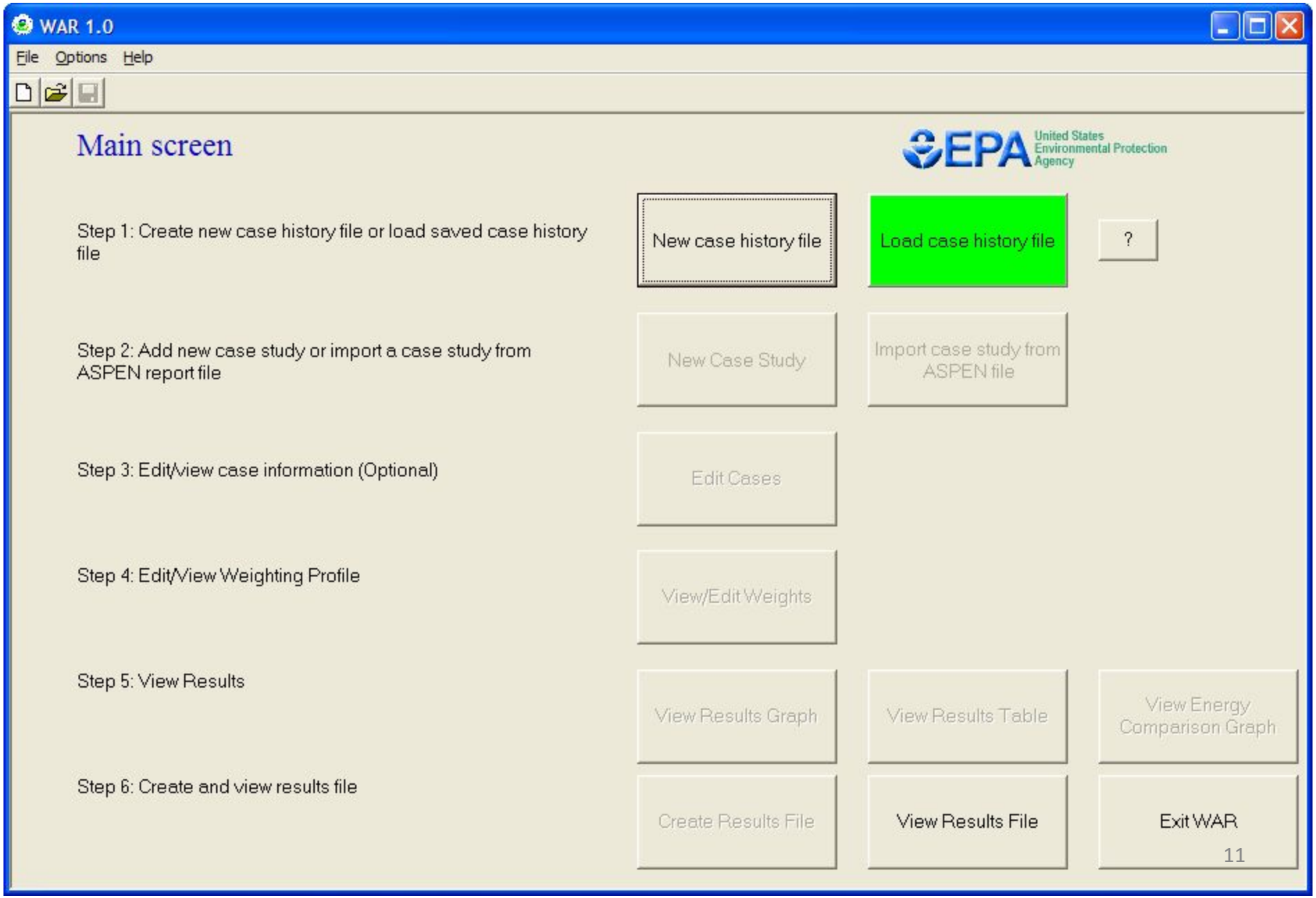
Використання WAR в COFE



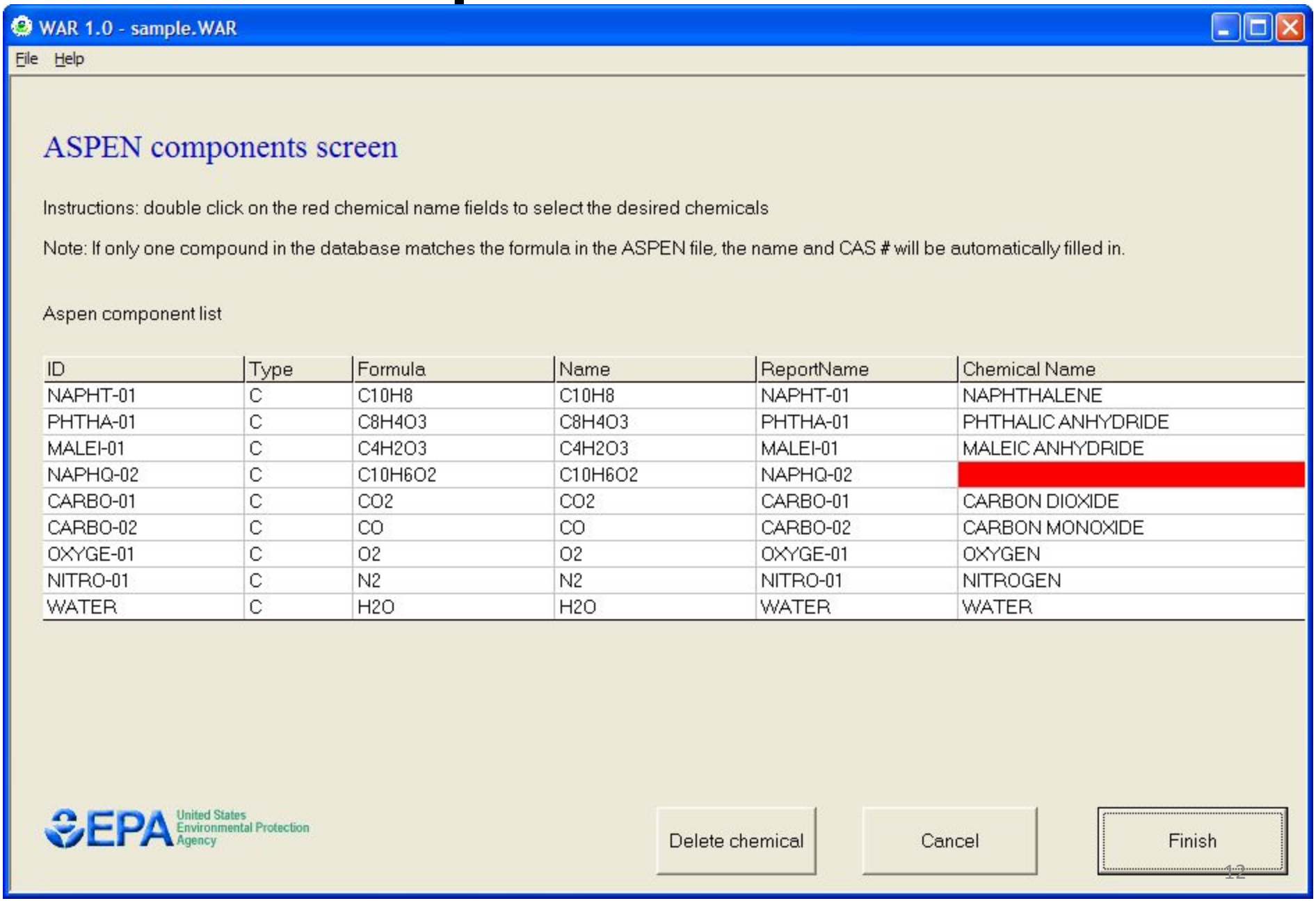
Використання WAR GUI



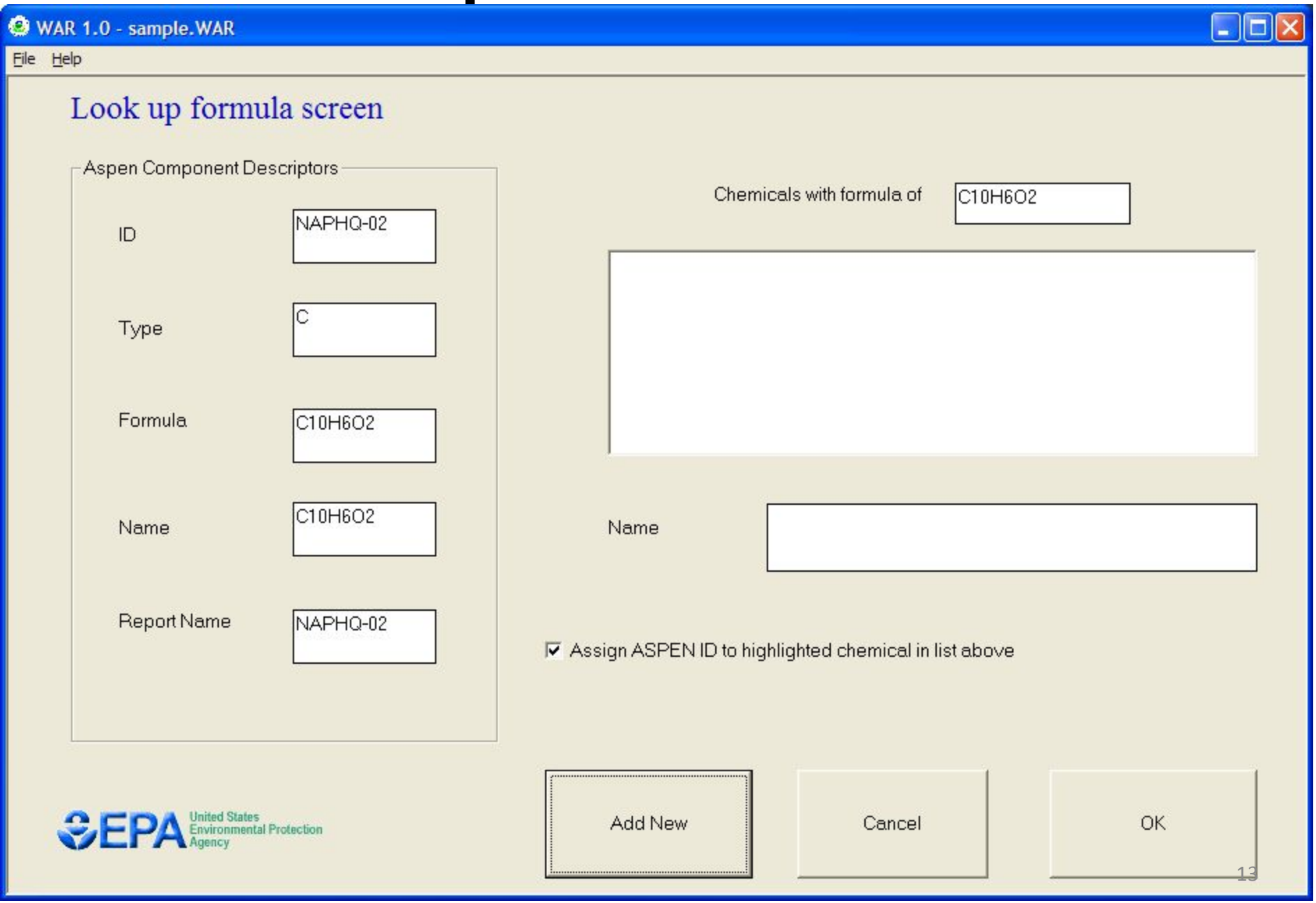
Використання WAR GUI



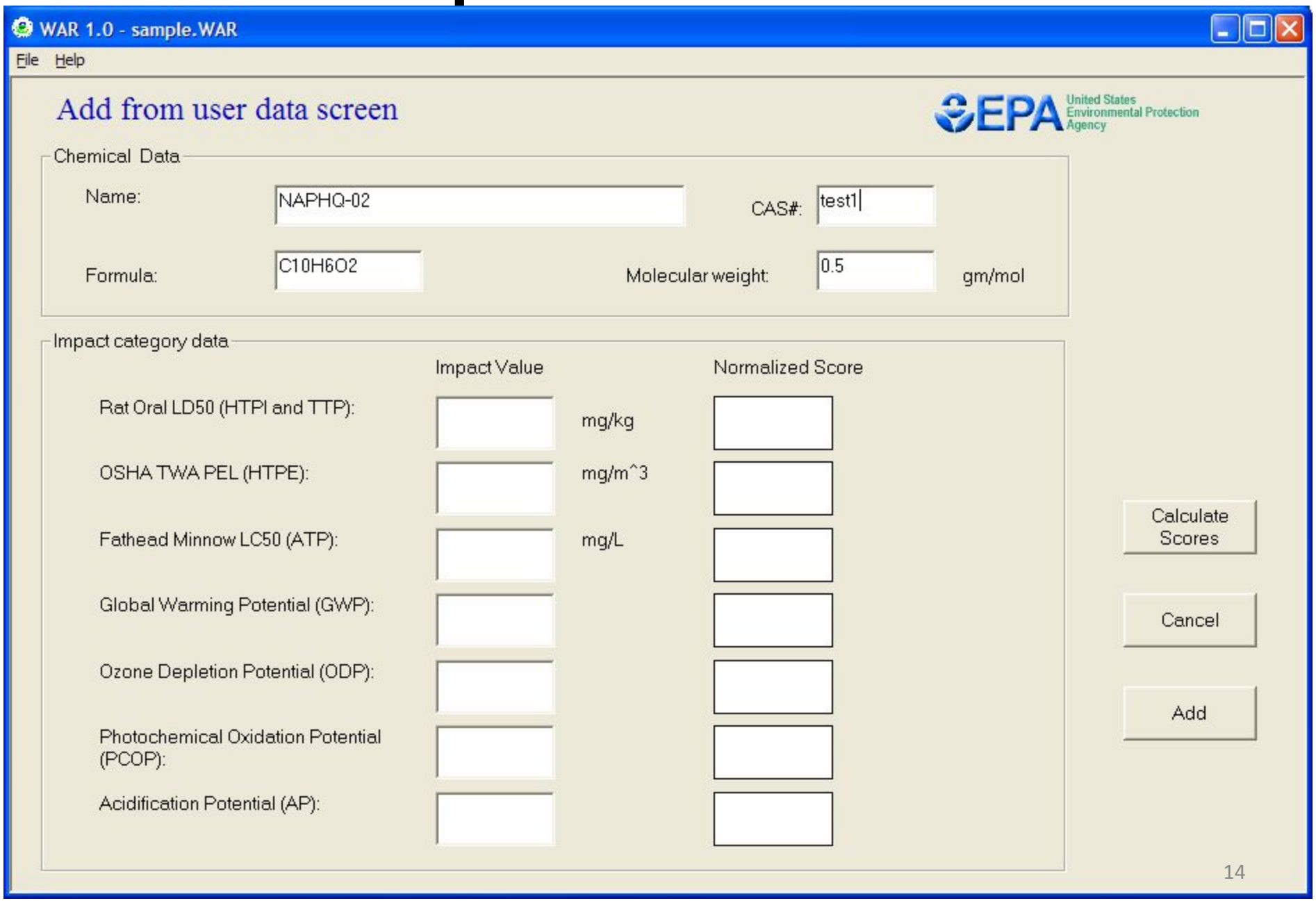
Використання WAR GUI



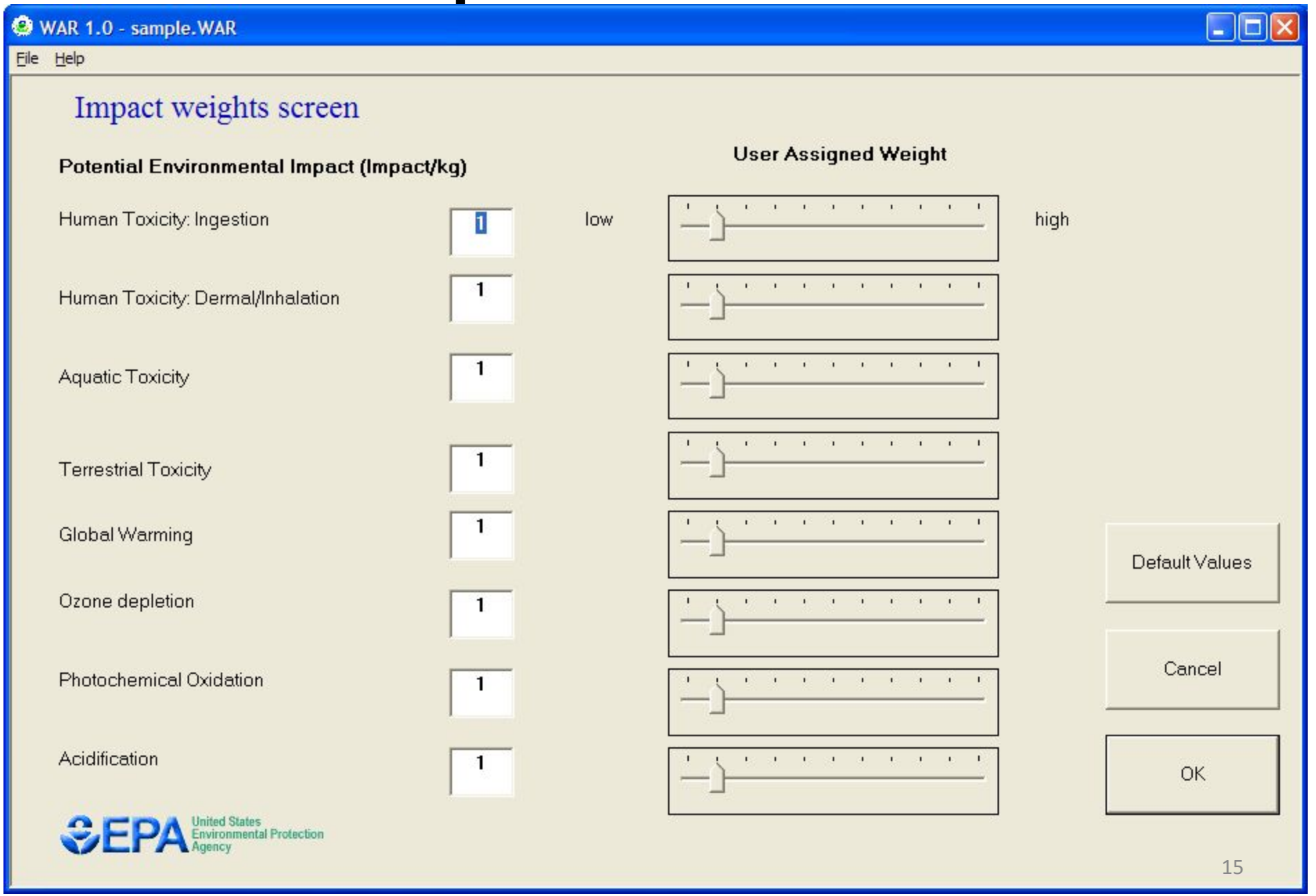
Використання WAR GUI



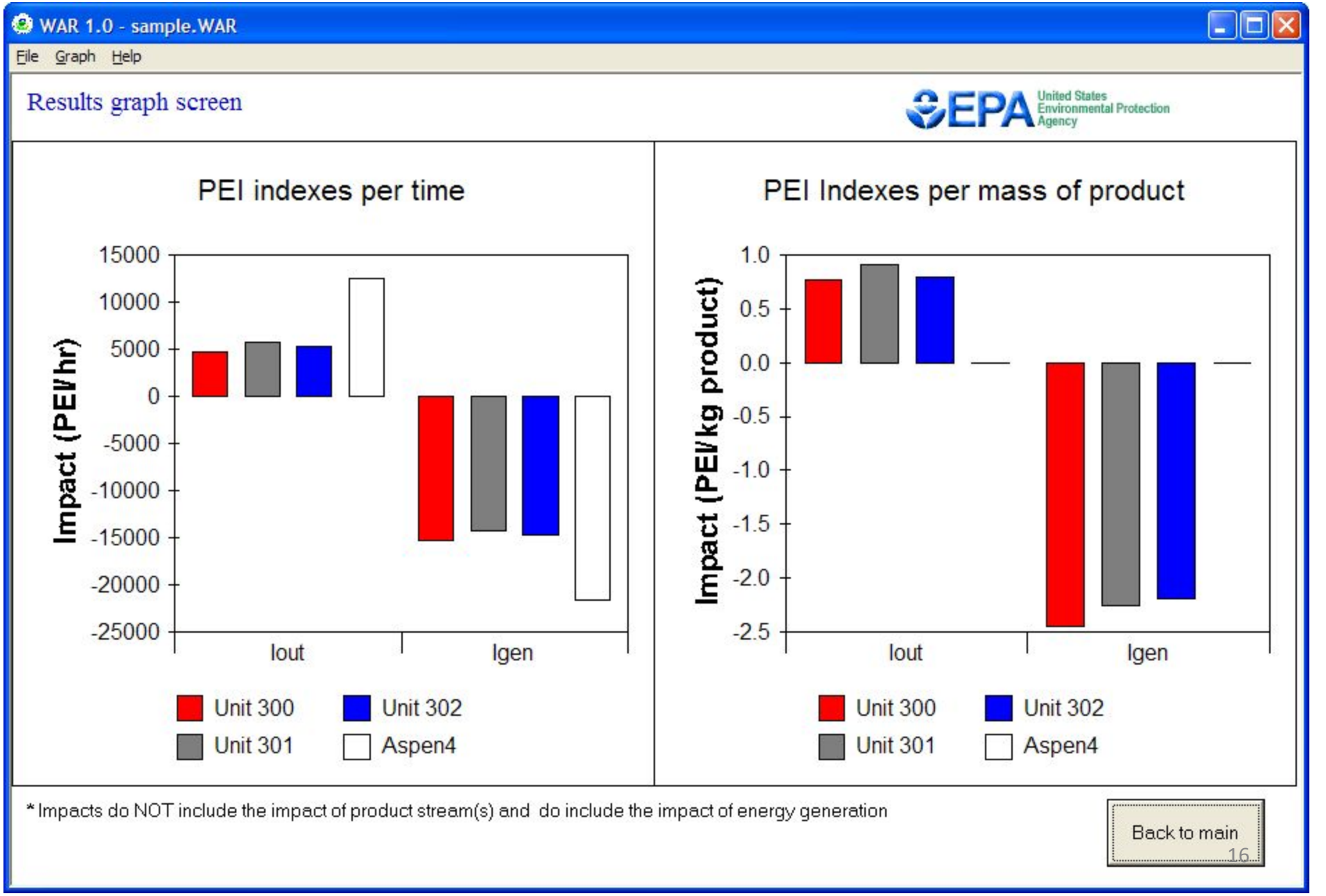
Використання WAR GUI



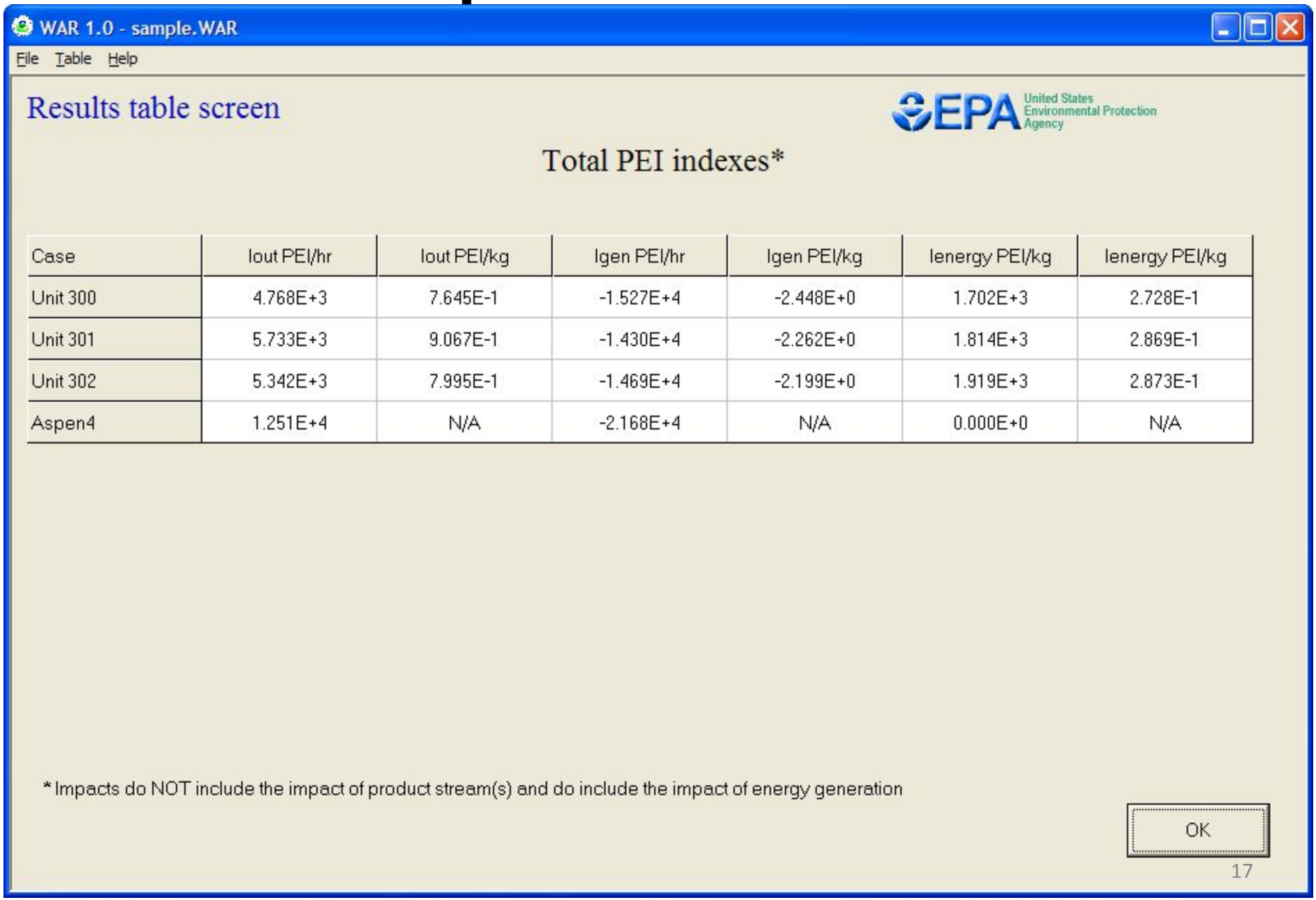
Використання WAR GUI



Використання WAR GUI



Використання WAR GUI



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	HTPE	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	HTPE	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	HTPE	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

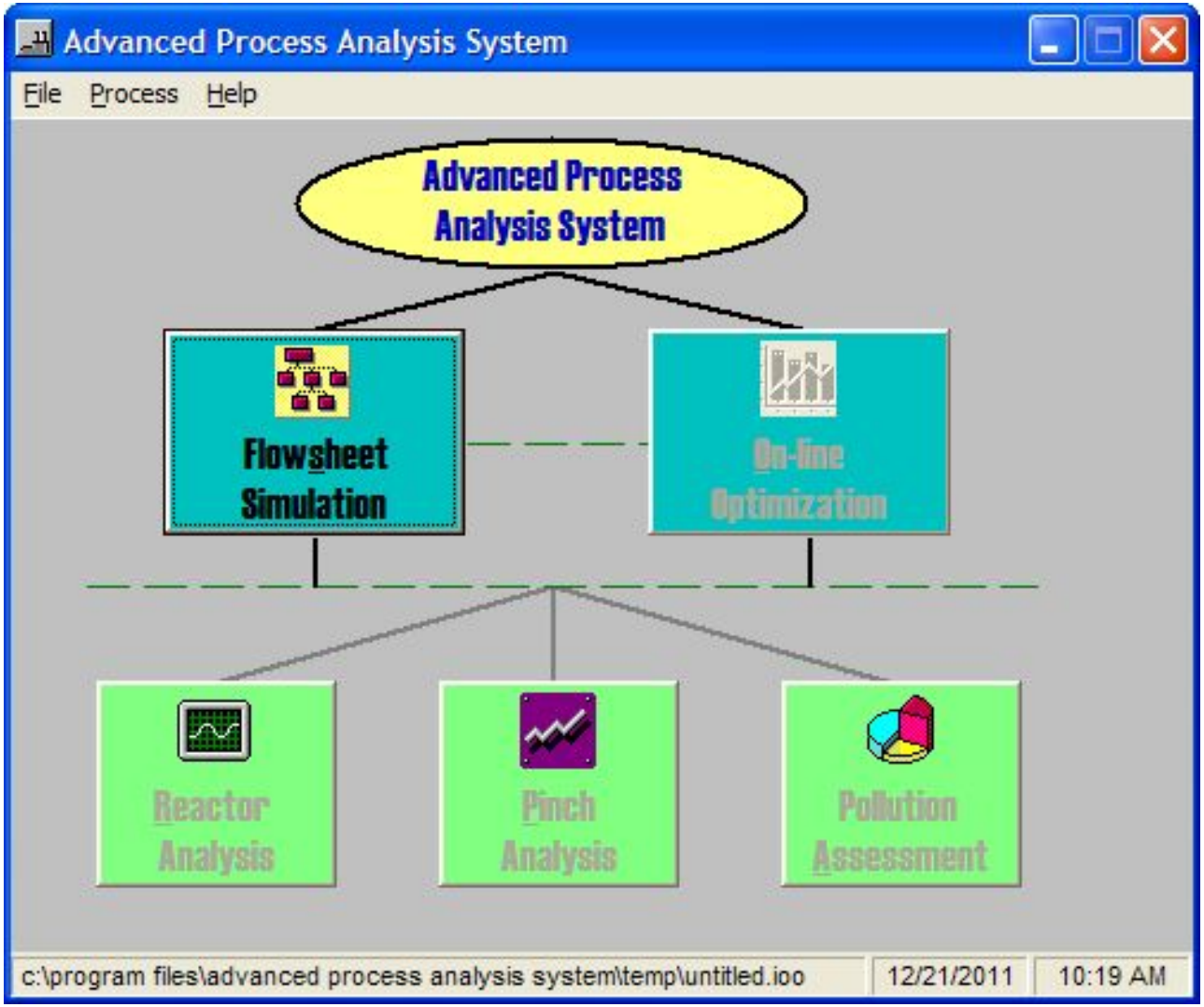
Total PEI generated within a system per mass of products (PEI/kg product)

Case	HTPI	HTPE	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

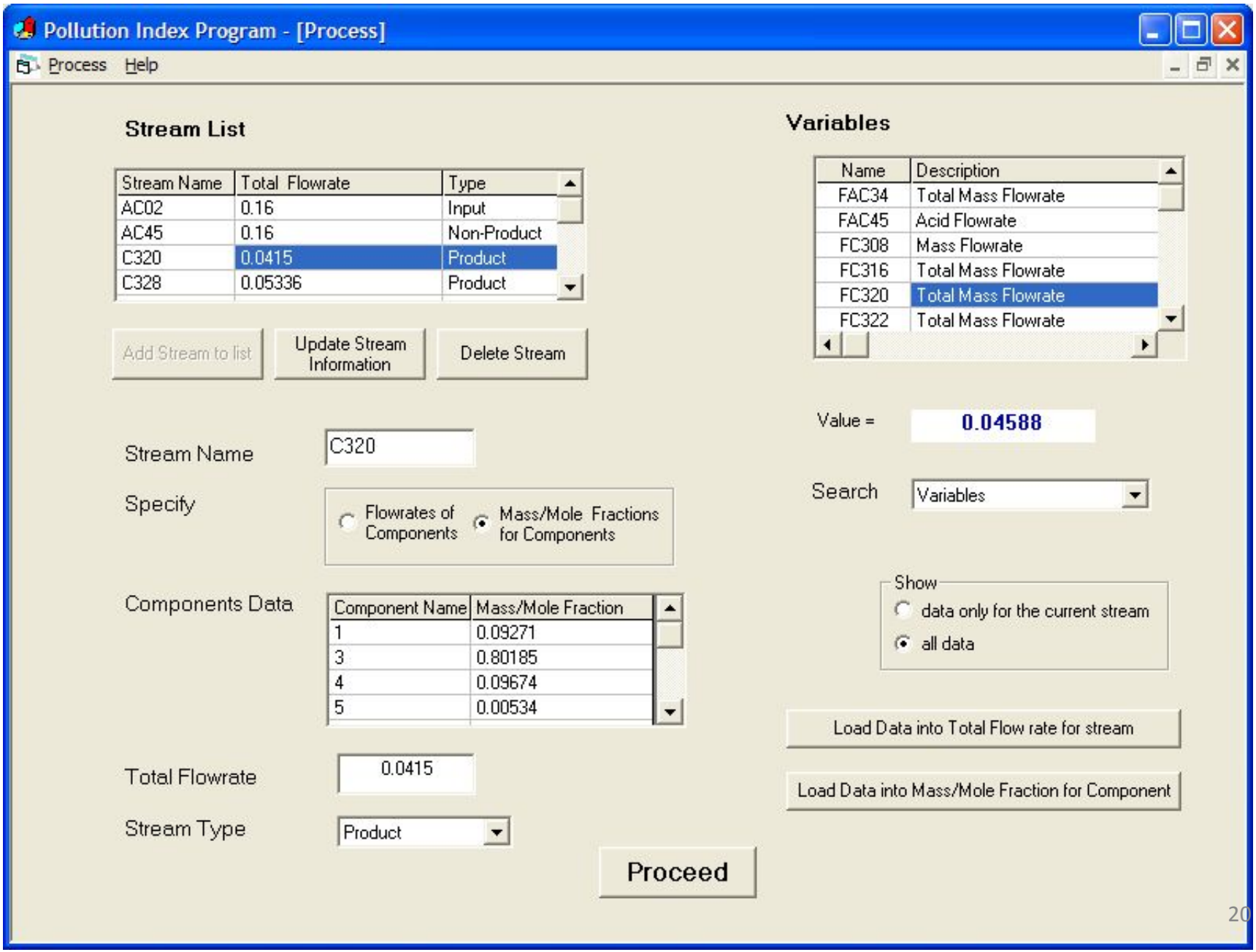
EPA United States Environmental Protection Agency

Close

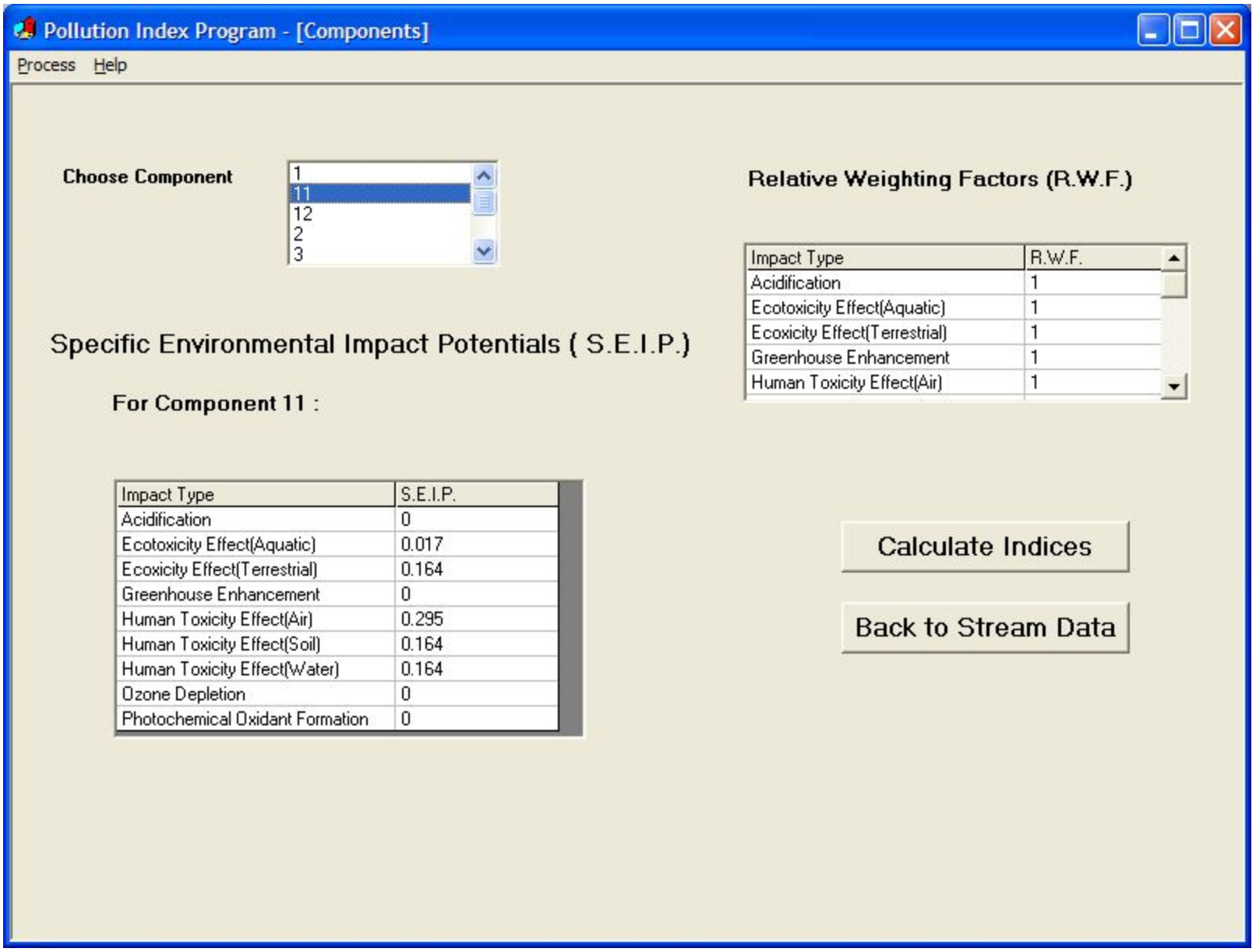
Використання WAR в Advanced Process Analysis System



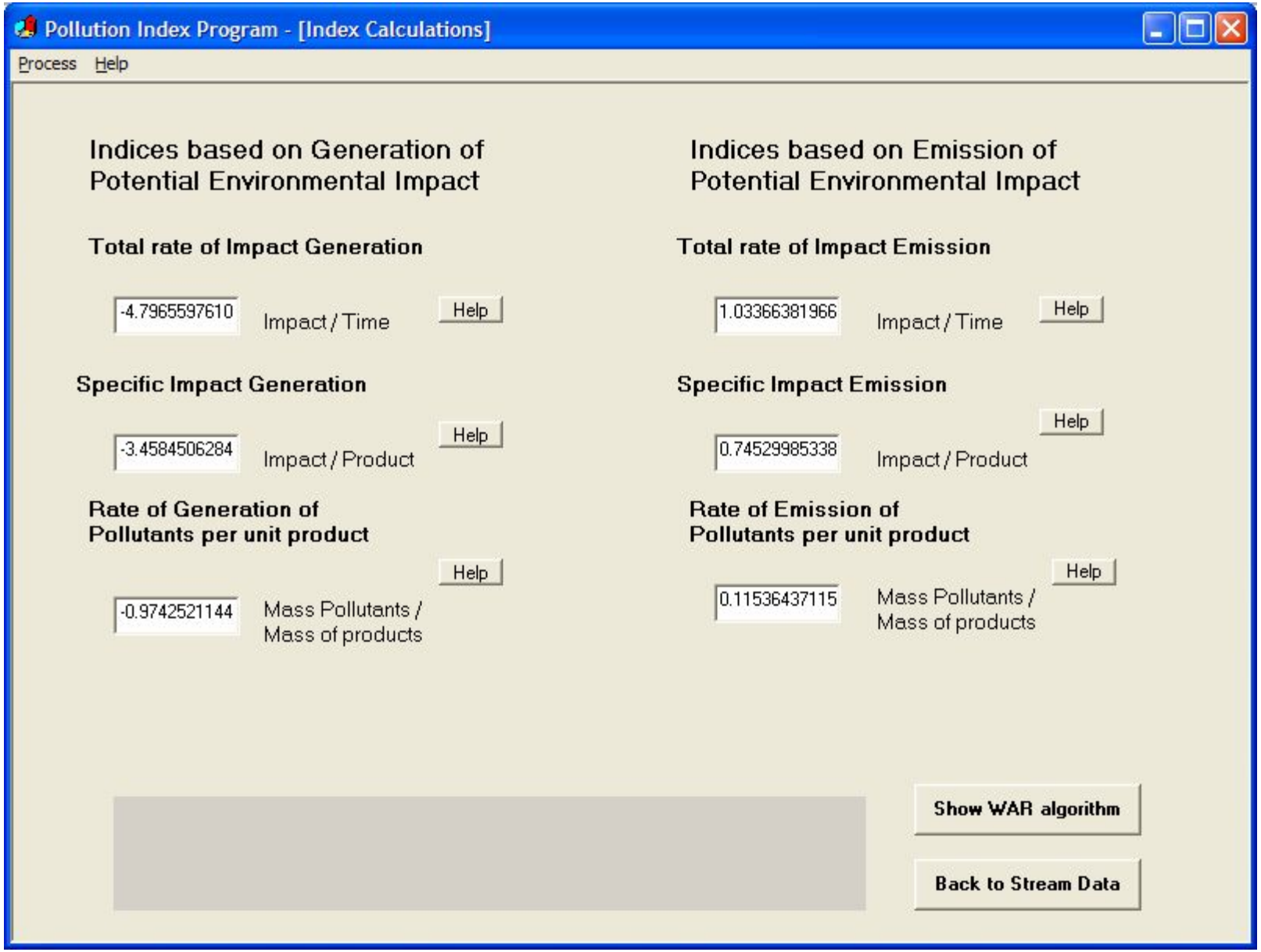
Використання WAR в Advanced Process Analysis System



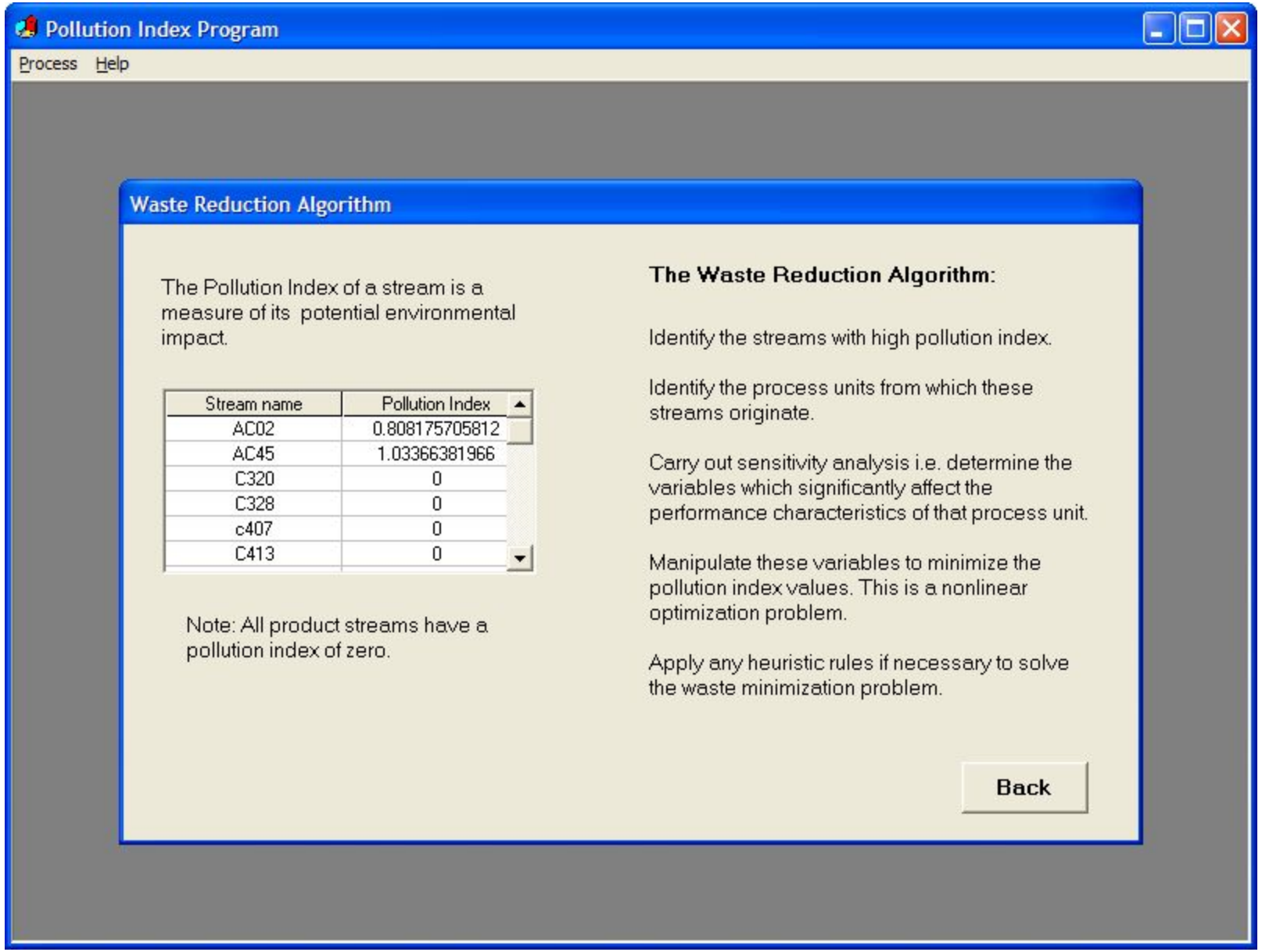
Використання WAR в Advanced Process Analysis System



Використання WAR в Advanced Process Analysis System

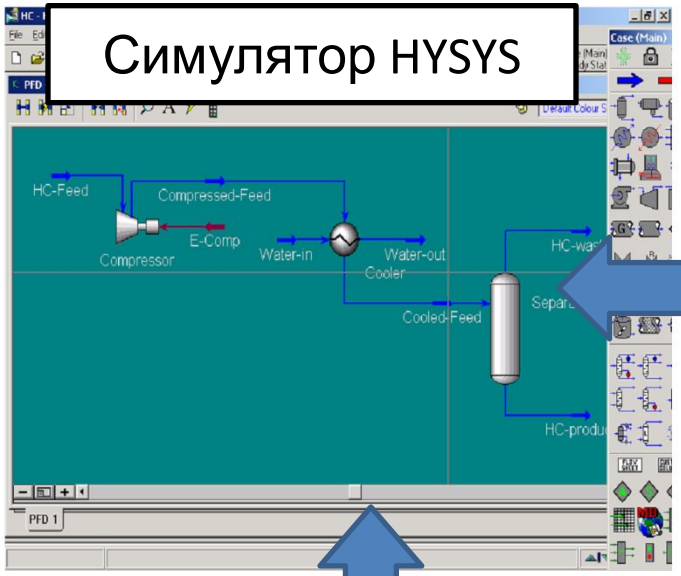


Використання WAR в Advanced Process Analysis System

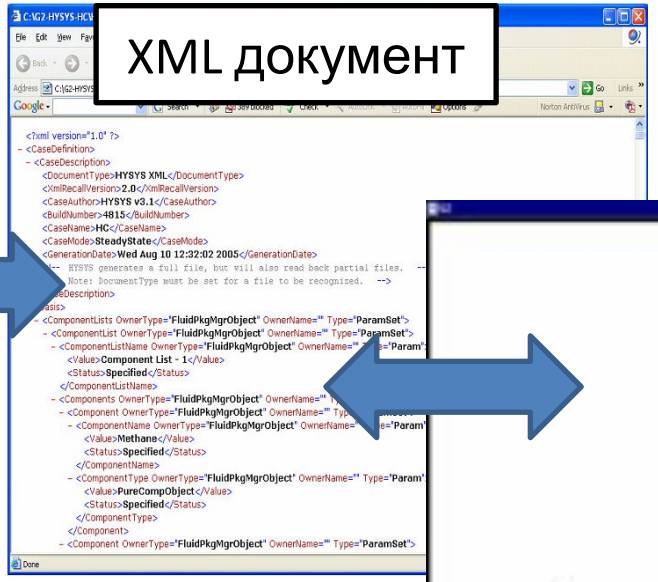


Використання WAR в HYSYS 2006 + gPROMS + ENVOPExpert

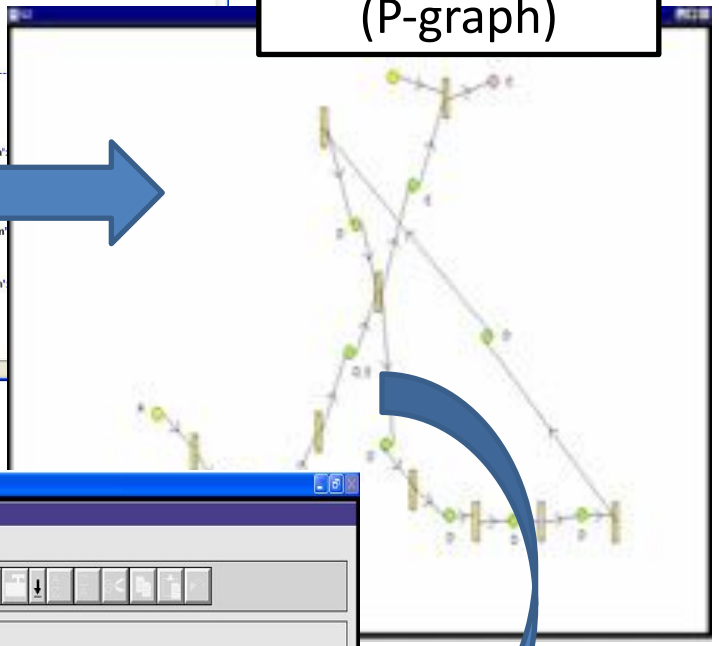
Симулятор HYSYS

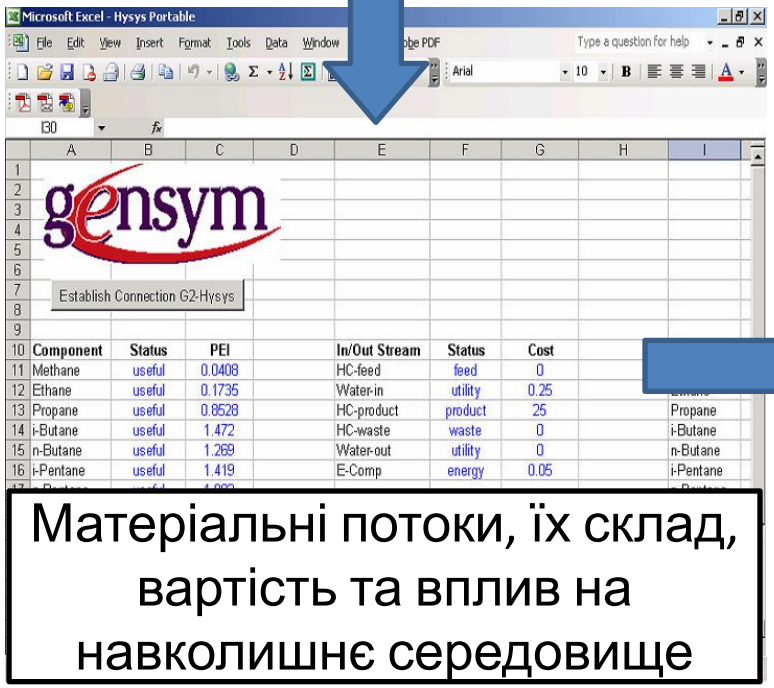


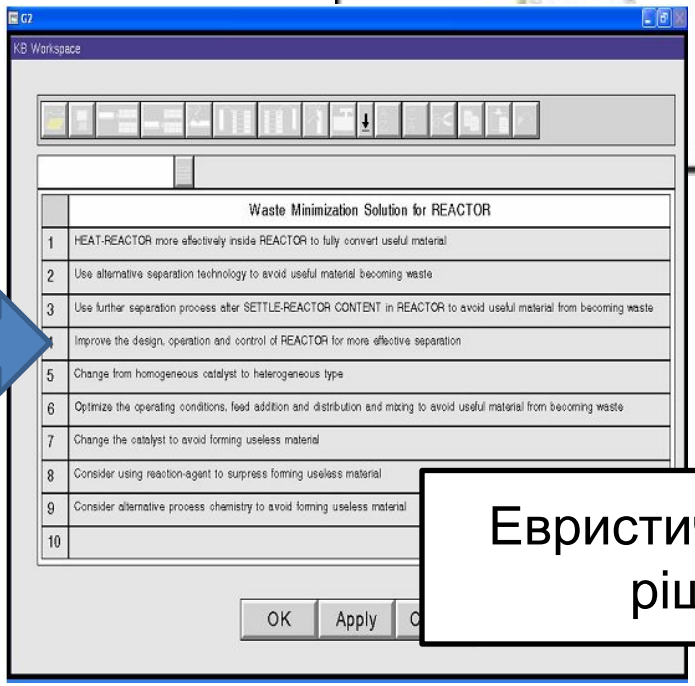
XML документ



Process graph (P-graph)







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

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 розділення	Покращення умов поділу

- Пошук рішення може бути зведений до рівня змінних, які 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 algorythm)**;

Дякую за увагу!