

# Кафедра информатики и компьютерного проектирования

## Моделирование химико-технологических процессов

Лектор – Советин Филипп Сергеевич, кандидат технических наук, доцент;

## Рекомендуемая литература:

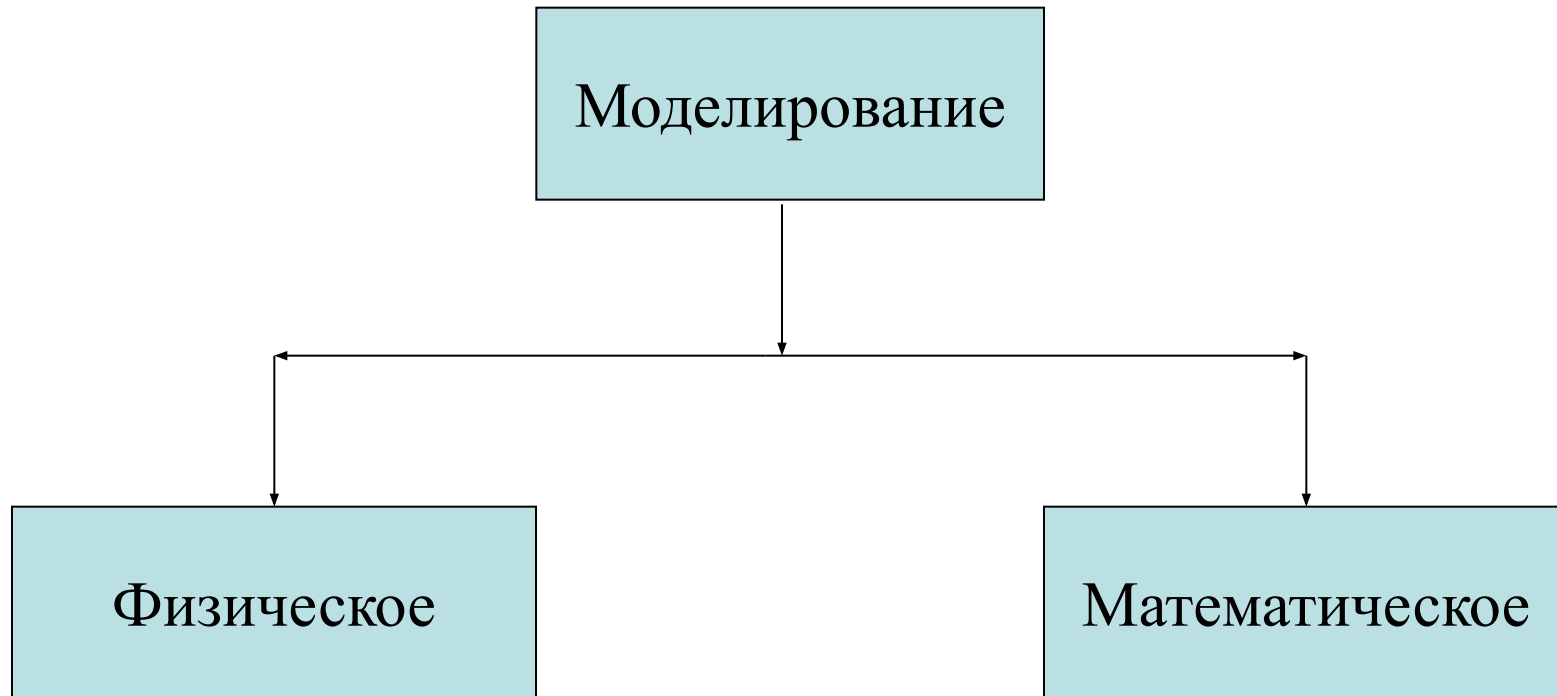
1. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов. М: ИКЦ «Академкнига», 2008. – 416 с.
2. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Моделирование химико-технологических процессов. Принципы применения пакетов компьютерной математики М: Издательство «Лань», 2019. – 404 с.
3. Бесков В. С. Общая химическая технология. – М: ИКЦ «Академкнига», 2005. – 452 с.

# Лекция № 1

## Основные понятия

**Модель** – условный образ объекта исследования, конструируемый исследователем так, чтобы отобразить характеристики объекта, существенные для исследования.

**Моделирование** – метод исследования объекта (процесса или производства) на его модели.



Впервые моделирование, как метод научного познания был впервые использован в аэро- и гидромеханике. Исследования проводились на установках небольшого масштаба (моделях), и результаты переносились на реальный объект большого масштаба. Для этого была развита теория подобия. Основой таких исследований является **физическое моделирование, при котором природа модели и исследуемого объекта одинаковы**. Примером физического моделирования – исследование обтекания самолёта воздухом на модели в аэродинамической трубе.

Физическое моделирование и теория подобия нашли широкое применение в химической технологии при исследовании тепловых и диффузионных процессов.

Попытки использования теории подобия для химических процессов и реакторов оказались неудачными вследствие ограниченности её применения. Причины заключаются в следующем. Химическое превращение зависит от явлений переноса теплоты и вещества, т. к. они создают соответствующие температурные и концентрационные условия в месте проведения химической реакции. В свою очередь, химическая реакция изменяет состав и теплосодержание (и, соответственно, температуру) реагирующей смеси, что изменяет перенос теплоты и вещества. Таким образом в реакционном технологическом процессе участвуют химическая (превращение веществ) и физическая (перенос) его составляющие. В аппарате небольшого размера выделяющаяся теплота легко теряется и слабо влияет на скорость превращения, поэтому основной вклад в результаты процесса вносит химическая реакция. В аппарате же большого размера выделяющаяся теплота «запирается» в

реакторе, существенно изменяя поле температур и, следовательно, скорость и результат протекания реакции. Следовательно, химические и физические составляющие

реакционного процесса в целом зависят от масштаба. Вклад физической составляющей в реакционный процесс в аппарате большого масштаба становится существенным.

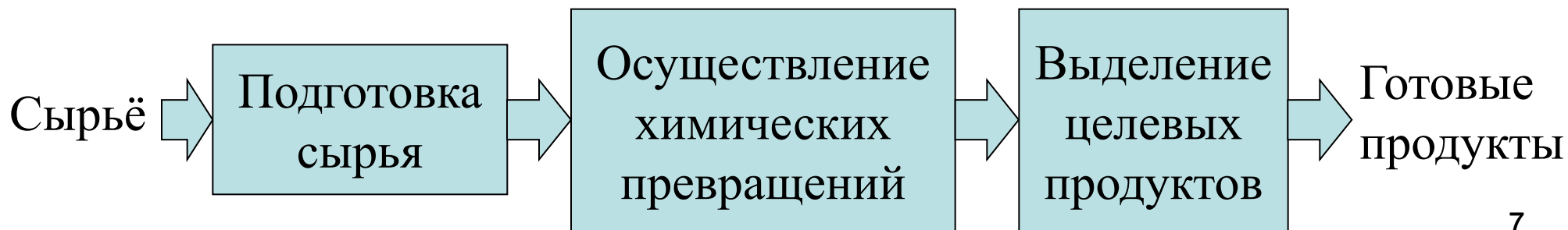
Другой причиной является несовместимость условий подобия для химических и физических составляющих процесса в реакторах разного масштаба. Например, превращение реагентов зависит от времени пребывания их в реакторе, равного отношению размера аппарата на скорость потока. Сделать одинаковыми в аппаратах разного масштаба и отношение, и произведение двух величин (в данном примере размера и скорости) невозможно.

Трудности масштабного перехода от объекта к модели для реакционных процессов удаётся преодолеть, используя **математическое моделирование, в котором модель и объект имеют разную физическую природу, но одинаковые свойства.**

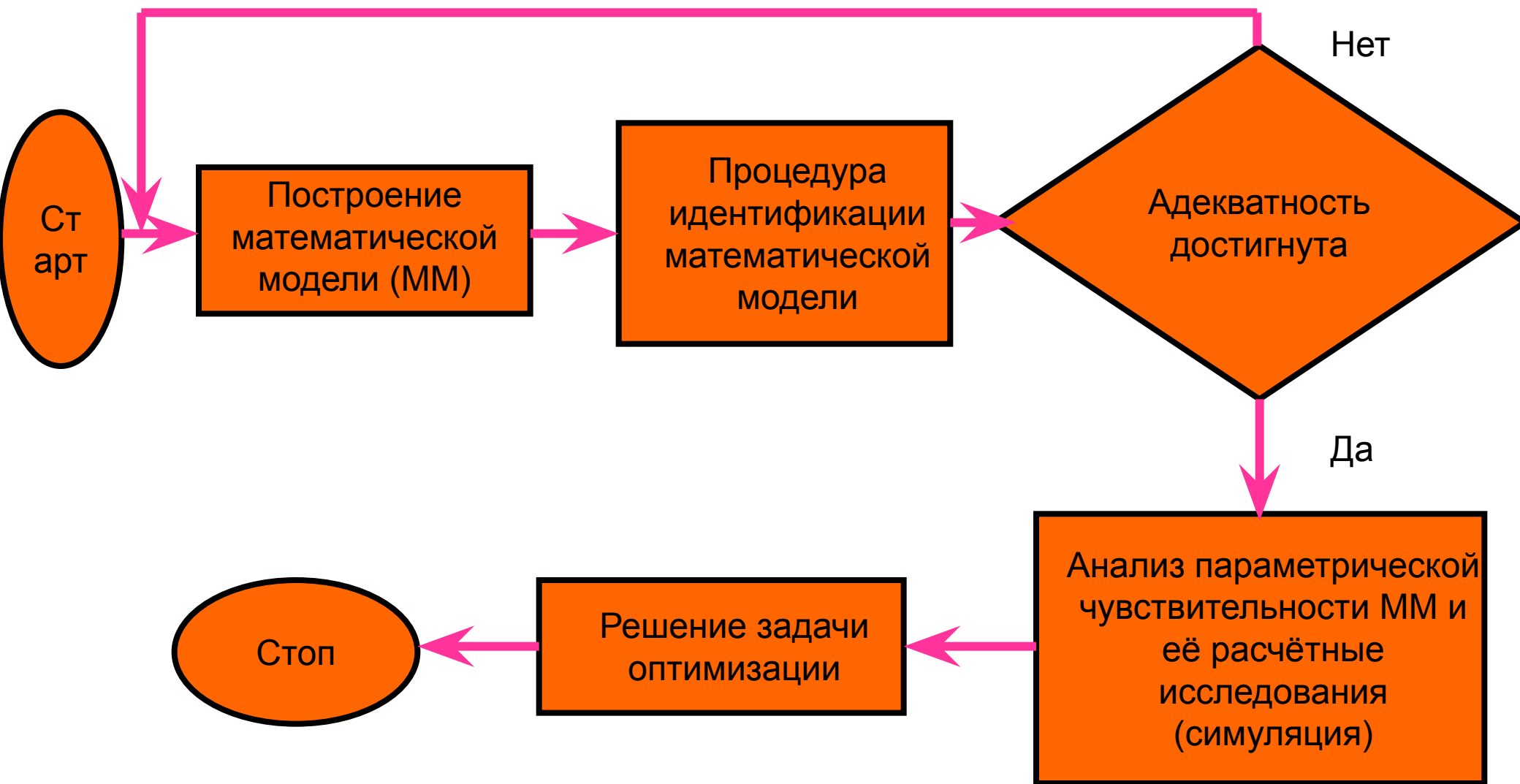
**Химико-технологический процесс (ХТП)** – это последовательность химических и физико-химических процессов целенаправленной переработки исходных веществ в продукты.

**Химическое производство** – это совокупность процессов переработки сырья в нужные продукты с использованием химических превращений, осуществляемых в предназначенных для этого аппаратах.

**Иерархическая структура (по горизонтали):**



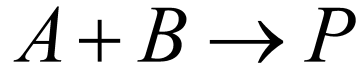
# Этапы компьютерного моделирования ХТП



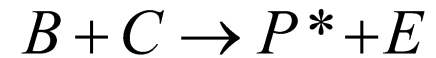
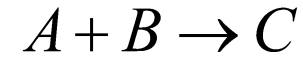


# §1. Системный анализ химико-технологических процессов (ХТП)

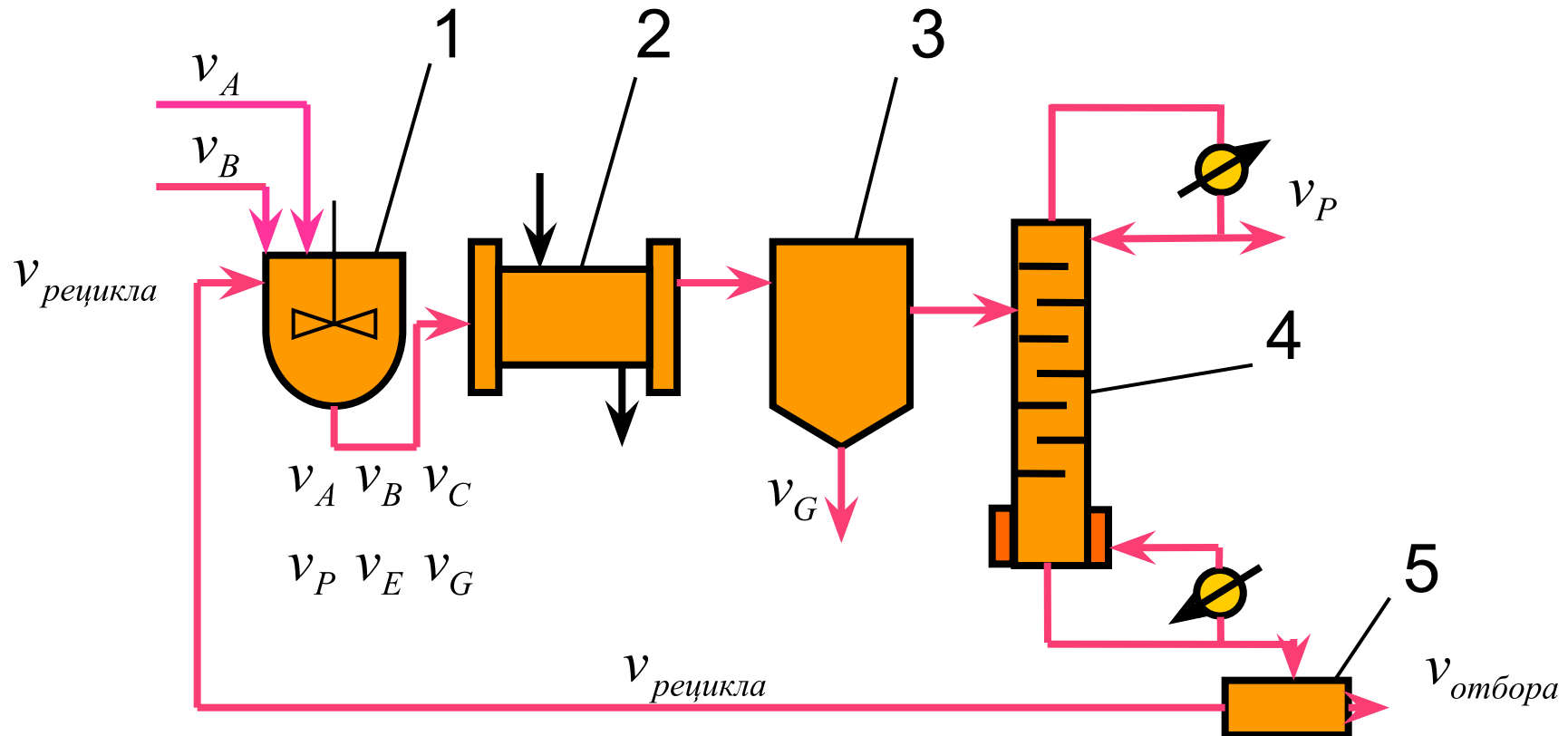
Реакция получения продукта P:



Основные стадии:

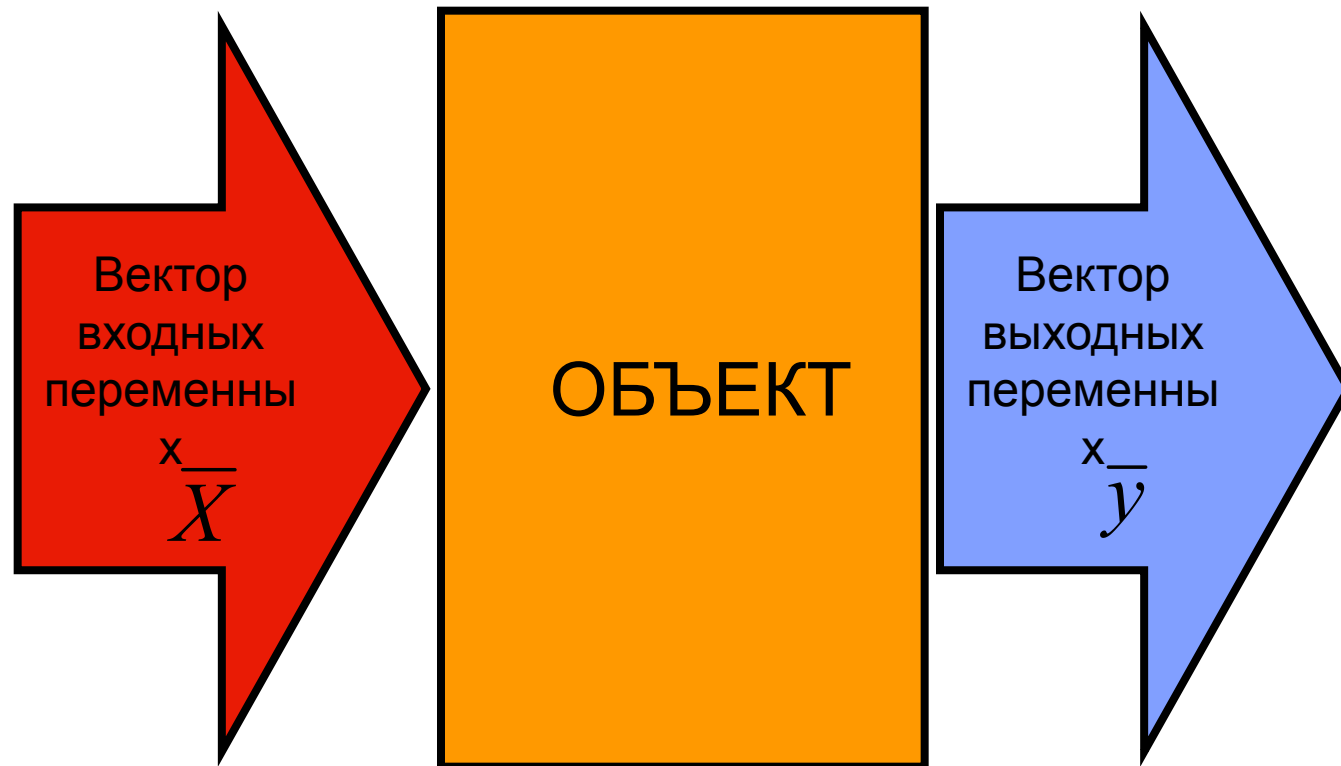


Технологическая схема процесса получения продукта P (ХТС)

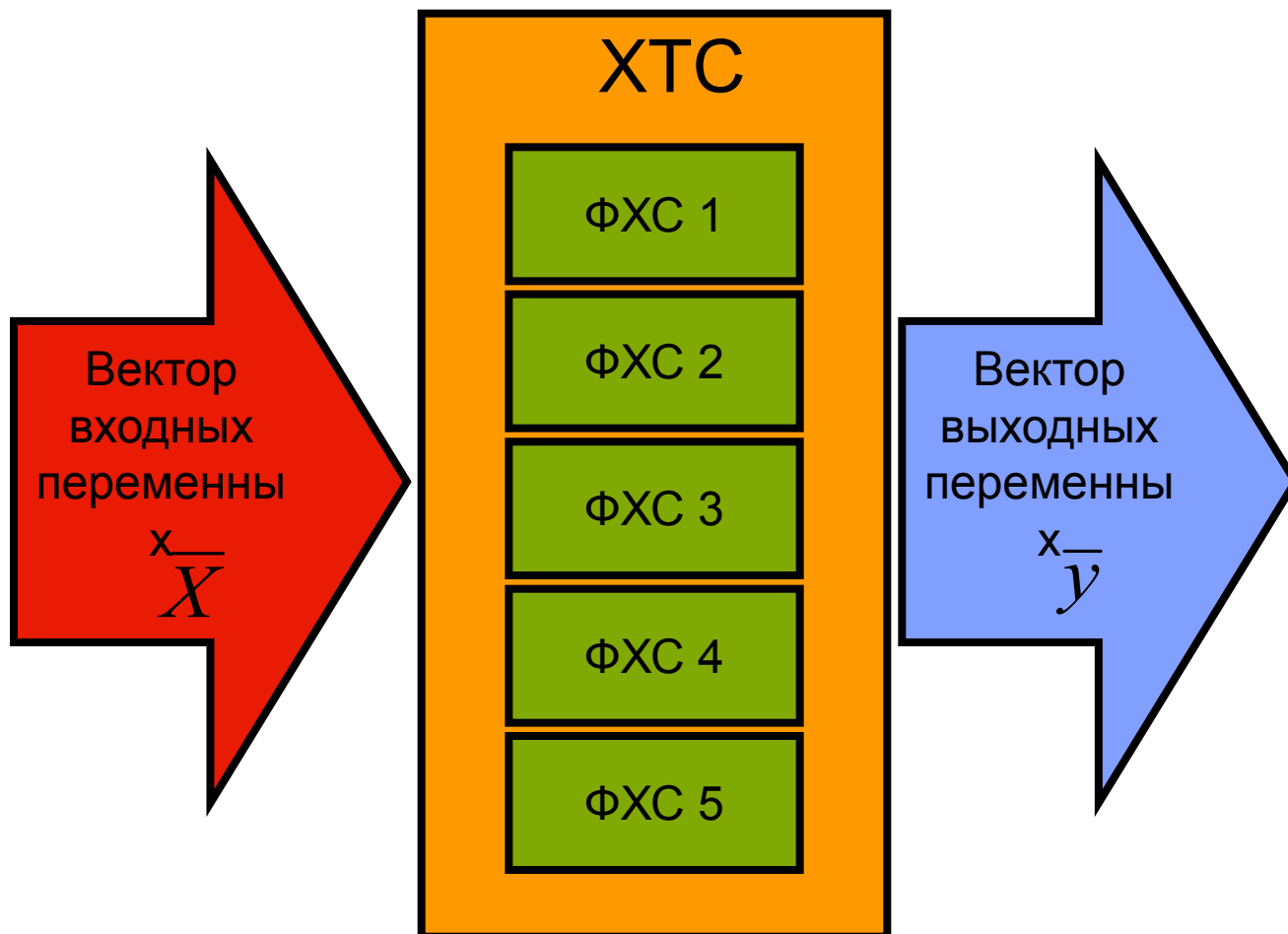


**ХТС** - технологическая схема процесса, которая рассматривается как совокупность тесно связанных подсистем (процессов в отдельных аппаратах), имеющих единую цель функционирования и подчиняющихся принципам системного анализа, в частности иерархичности, комплексности и иерархической соподчинённости.

В общем случае химико-технологический процесс (ХТП) формализуется как физико-химическая система – ФХС.



**ФХС** – многофазная многокомпонентная сплошная среда, распределённая в пространстве и переменная во времени, в каждой точке гомогенности которой и на границе раздела фаз происходит перенос вещества, энергии и импульса при наличии их источников (стоков).



- Иерархичность
- Комплексность
- Иерархическая соподчинённость

Иерархическая соподчинённость: на верхних ступенях иерархии системы учитываются наиболее приоритетные процессы, которые протекают на более низких ступенях. В то же время тщательное исследование процессов на более низких ступенях иерархии системы очень важно, т.к. это позволяет определить те самые приоритетные процессы, которые должны быть учтены на более высоких ступенях иерархии.

## Уровни иерархии химических производств

1. Микроуровень – процессы и явления описываются без учёта влияния закономерностей движения потоков фаз в аппаратах
2. Макроуровень (ФХС) – секции аппаратов или весь аппарат. Все процессы записываются с учётом закономерностей движения потоков фаз.
3. Уровень химического производства (ХТС) - совокупность аппаратов, связанных между собой материальными, тепловыми, информационными потоками.
4. Уровень предприятия – несколько производств, объединённых цепью функционирования. Действуют экономические закономерности.
5. Уровень компании или объединения.

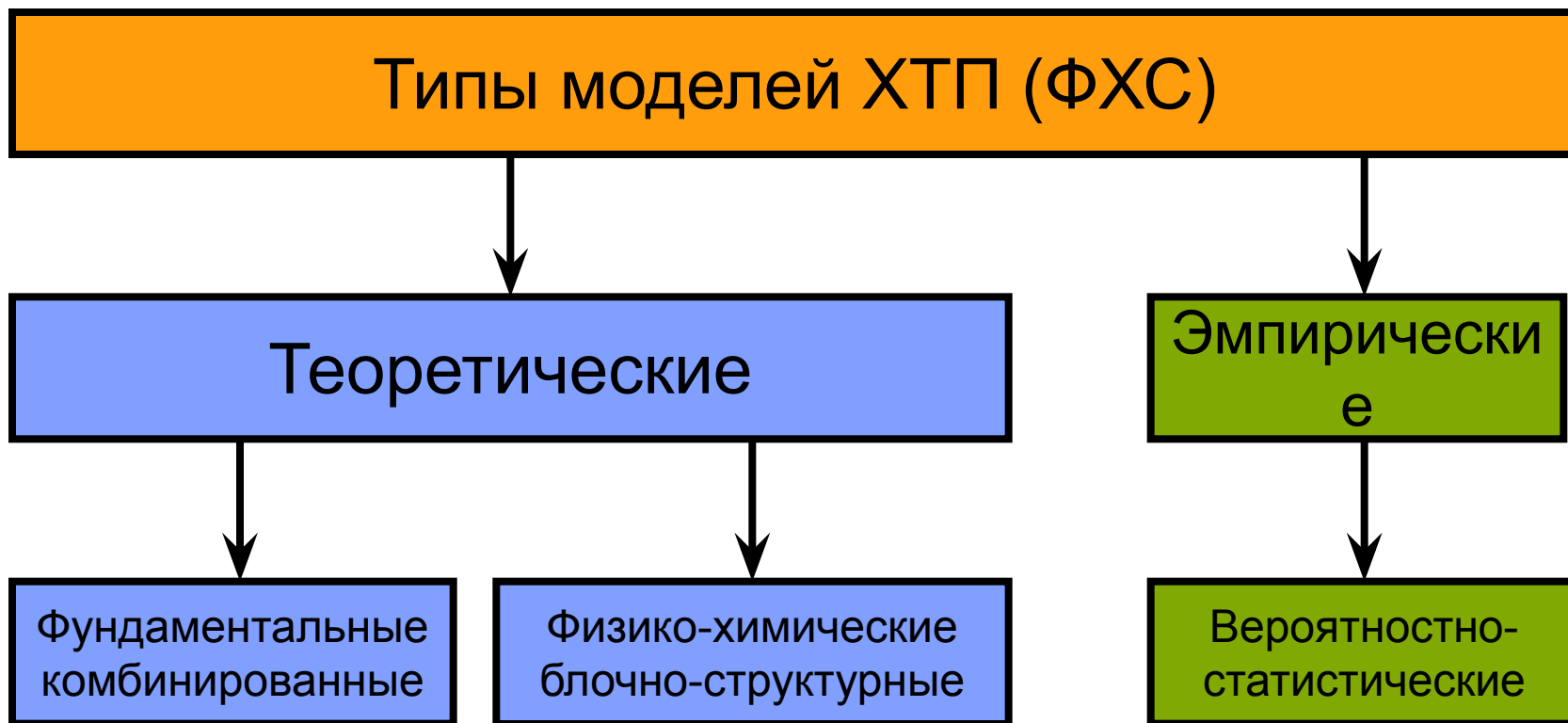
## §2. Математическое моделирование ХТП (ФХС)

ДВА АСПЕКТА МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ:

- Построение математической модели – МОДЕЛИРОВАНИЕ ХТП
- Расчётные исследования математической модели – СИМУЛЯЦИЯ ХТП

### МОДЕЛИРОВАНИЕ ХТП

- Системный анализ объекта моделирования
- Синтез функционального оператора физико-химической системы (ФХС) и построение системы уравнений математического описания процесса (МО)
- Разработка моделирующего алгоритма (МА) и его реализация на компьютере (создание расчетного модуля процесса)



№ эксп.	$T_i$		$c_{pi}^э$
1	$T_1$		$c_{p1}^э$
2	$T_2$		$c_{p2}^э$
.....	....		.....
$n$	$T_n$		$c_{pn}^э$

$$T_1 \leq T \leq T_n$$

$$c_p = a + vT$$

$$c_p = a + vT + cT^2$$

$$c_p = a + vT + cT^2 + dT^3$$

$$c_p = a + vT + \frac{c'}{T^2}$$

При построении физико-химической модели ХТП  
решается прямая задача компьютерного моделирования

$$\bar{X} \rightarrow \bar{Y}^p$$

При построении эмпирической модели ХТП  
решается обратная задача компьютерного  
моделирования

$$\left. \begin{array}{l} \bar{X} \\ \bar{Y}^э \end{array} \right\} \rightarrow \bar{a}$$



### 3 этапа построения физико-химических блочно-структурных моделей

**1.** Изучение свойств объекта моделирования (теоретическое, экспериментальное) – анализ структуры технологического или физико-химического оператора:

$$\bar{y} = \Omega(\bar{X})$$

$\Omega$  – технологический или физико-химический оператор

**2.** Составление уравнений математического описания (МО) – синтез функционального оператора:

$$\hat{y} = \Phi(\bar{X}, \bar{a})$$

$\Phi$  – функциональный оператор МО       $\bar{a}$  - коэффициенты уравнений МО

**3.** Построение алгоритма решения системы уравнений МО – моделирующего алгоритма МА.

## Алгоритм решения системы уравнений МО или моделирующий алгоритм (МА)

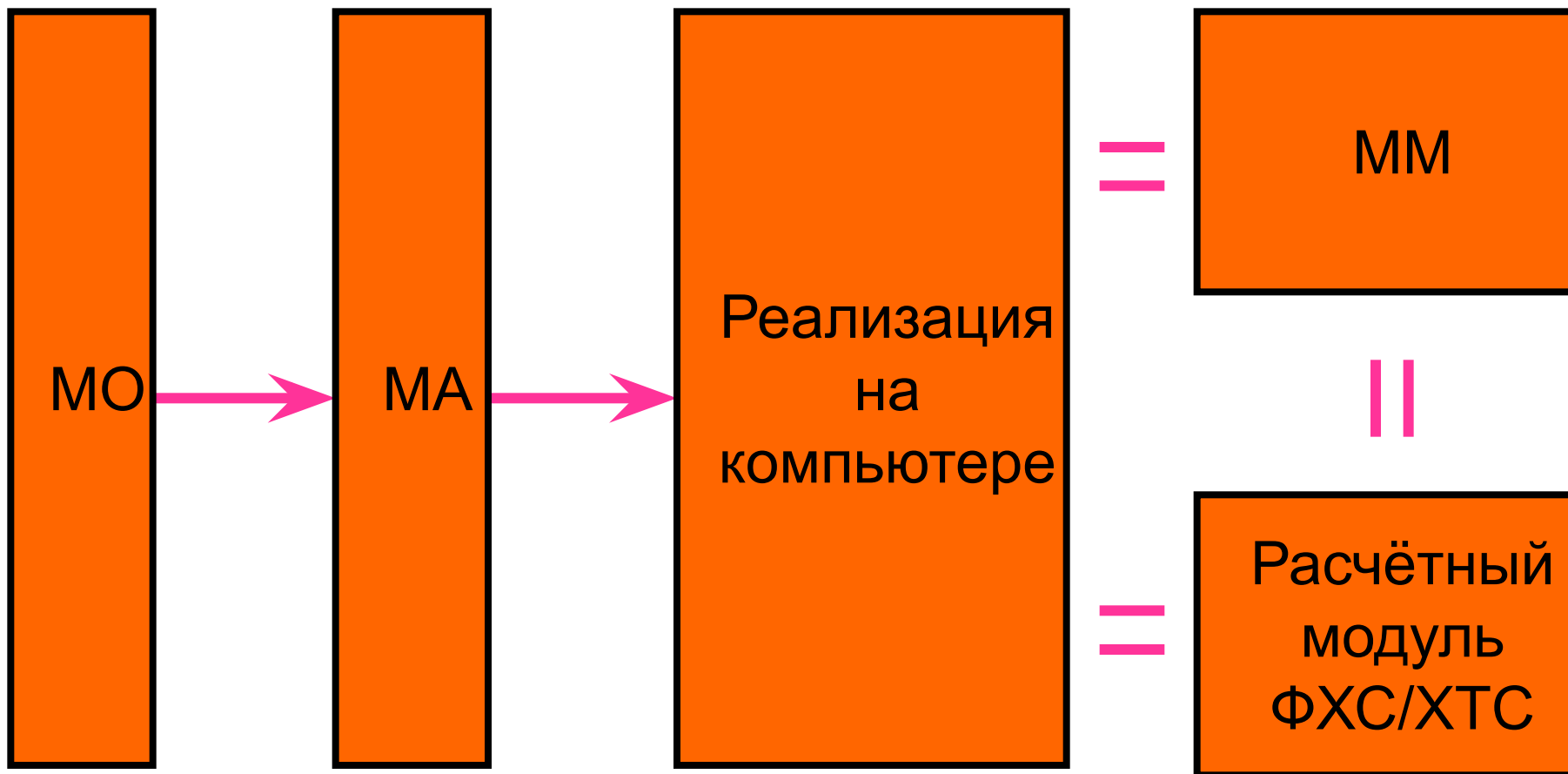
$$\bar{y}^{\text{расч.}} = \bar{\varphi}(\bar{X}, \bar{a})$$

### Математическая модель

ММ – это реализованный на компьютере алгоритм (МА) решения системы уравнений математического описания.

ММ – система уравнений, которая связывает между собой входные и выходные переменные реального процесса, для прогнозирования свойств которого необходимо с помощью специального алгоритма решить эту систему уравнений и реализовать этот алгоритм на компьютере.

# Этапы построения физико-химических моделей



# Основные численные алгоритмы, используемые для построения физико-химических моделей ХТП:

- Решение систем линейных и нелинейных уравнений СЛУ
- Решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений СОДУ
- Решение систем дифференциальных уравнений в частных производных СДУЧП

# Этапы построения эмпирических моделей

Экспериментальные исследования

Выбор вида функции  $y(\bar{x})$

Определение коэффициентов  
эмпирической модели

Расчётный  
модуль  
ФХС/ХТС

=

ММ

# СИМУЛЯЦИЯ ХТП

- Расчётные исследования ХТП с использованием его математической модели
- Для моделей, описывающих стационарные режимы процессов, определение статических характеристик объекта моделирования, т. е. получение зависимостей выходных переменных от изменения входных (условно-независимых) переменных
- Для моделей, описывающих нестационарные режимы процессов, определение динамических характеристик объекта моделирования, т.е. зависимостей выходных переменных от времени

### §3. Идентификация математического описания объектов моделирования

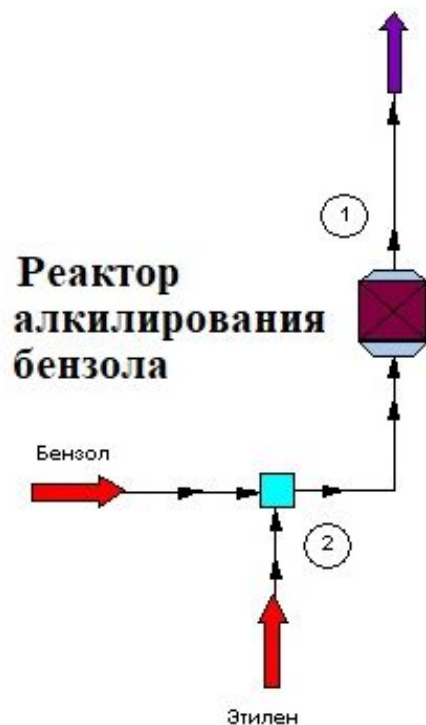
Адекватность – соответствие ММ реальному объекту и качественное (тенденции изменения переменных в модели и в объекте одинаковы) и количественное (экспериментальные данные).

$$\left\| \bar{y}^{\text{расч}} - \bar{y}^{\text{эксп}} \right\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n \left( y_i^{\text{расч}} - y_i^{\text{эксп}} \right)^2} = \varepsilon,$$

где  $\varepsilon$  не больше погрешности экспериментальных измерений.

Если адекватность не достигнута, необходимо решить задачу идентификации

**Сравнение результатов расчетов процесса  
алкилирования бензола  
с экспериментальными данными**



Параметр	На входе – смесь этилена и бензола, подаваемая на алкилирование		На выходе – алкилат
	Расчетные данные	Расчетные данные	Экспериментальные данные
Давление, МПа	0,2	0,2	–
Температура, °С	25	100	–
Массовый расход, т/ч	106,17	105,703	–
Массовая доля компонента, % мас.			
$C_6H_6$	73,24	19,64	19,6
$C_6H_5C_2H_5$	0,3	50,09	49,3
$C_6H_4(C_2H_5)_2$	0,04	27,21	27,1
$C_6H_3(C_2H_5)_3$	–	3,06	3,57
$C_2H_4$	26,42	–	–



# Идентификация математического описания ХТП и их оптимизация

Идентификация – частный случай оптимизации, когда ищется наименьшее значение критерия рассогласования

$$\min \left\| \bar{y}^{\text{расч}} - \bar{y}^{\text{эксп}} \right\|$$

Структурная идентификация:

$$\Phi \in \Phi^{\text{доп}}$$

Параметрическая идентификация

$$\bar{a} \in \bar{a}^{\text{доп}}$$

## §4. Оптимизация процессов с использованием математических моделей

1) Целевая функция – критерий оптимальности  $R$

$$R = R(\bar{y}^{\text{расч}})$$

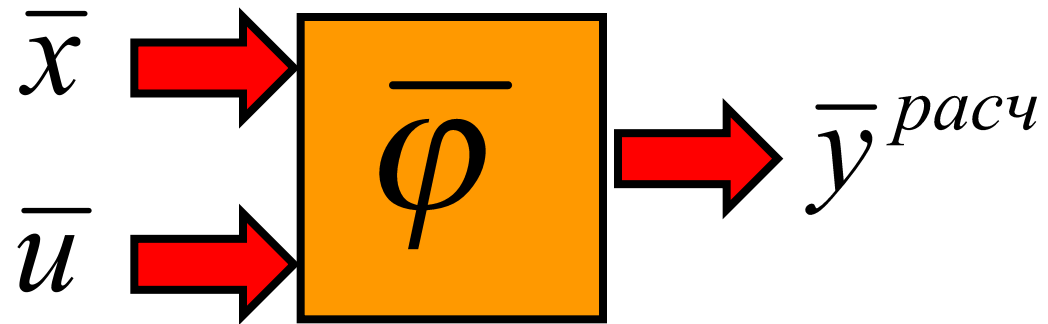
Виды критериев оптимальности:

- Технологические
- Экономические
- Техничко-экономические
- Термодинамические

## 2) Ресурсы оптимизации

$$\bar{X} = \begin{bmatrix} \bar{x} \\ \bar{u} \end{bmatrix}$$

$\bar{u}$  - оптимизирующие (управляющие) переменные



$$\bar{y}^{расч} = \bar{\varphi}(\bar{x}, \bar{u}, \bar{a}) \quad - \text{МА}$$

### 3) Алгоритм оптимизации

Формулировка задачи оптимизации для многих переменных

$$\begin{array}{l} \mathit{opt} \ R(\bar{u}) \\ \bar{u} \in \bar{u} \text{ допуст.} \end{array}$$

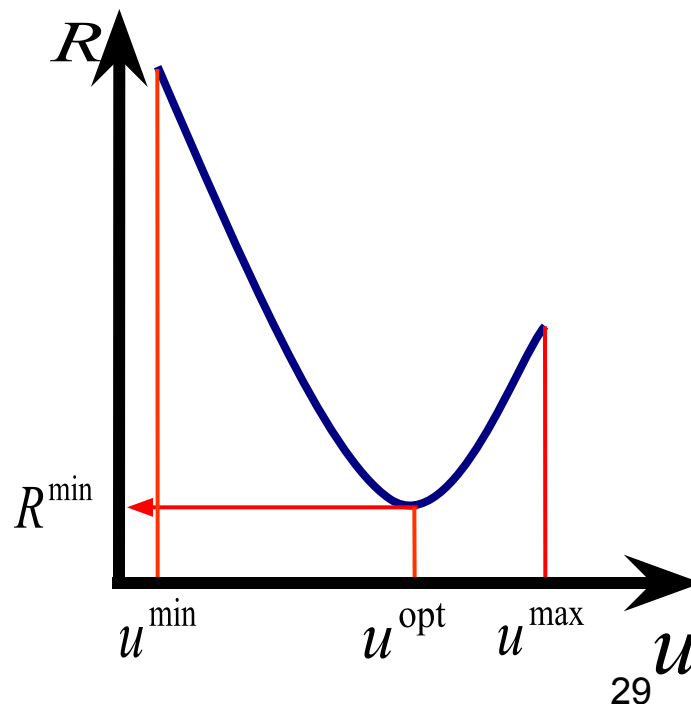
# Результат решения задачи оптимизации

$$\left. \begin{array}{l} \bar{u}^{\text{opt}} \\ R^{\text{opt}} \end{array} \right| \text{alg Opt}$$

Решение задачи для одной переменной:

Поиск:

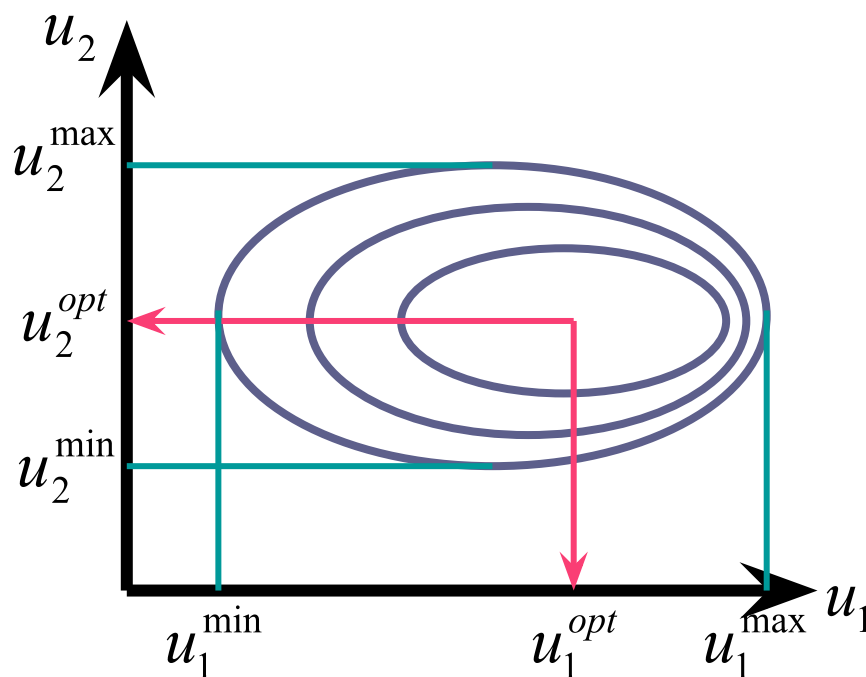
$$\begin{array}{c} \textit{opt} \\ u^{\min} \leq u \leq u^{\max} \end{array} R(u)$$



Результат решения задачи одномерной оптимизации:

$$\begin{array}{c} u^{\text{opt}} \\ R^{\text{min}} \end{array} \left| \text{alg Opt} \right.$$

Графическое изображение оптимального значения в параметрической плоскости для двух оптимизируемых переменных:



# Формулировка задачи нелинейного программирования (НЛП)

$$\mathit{opt} \ R(\bar{u})$$

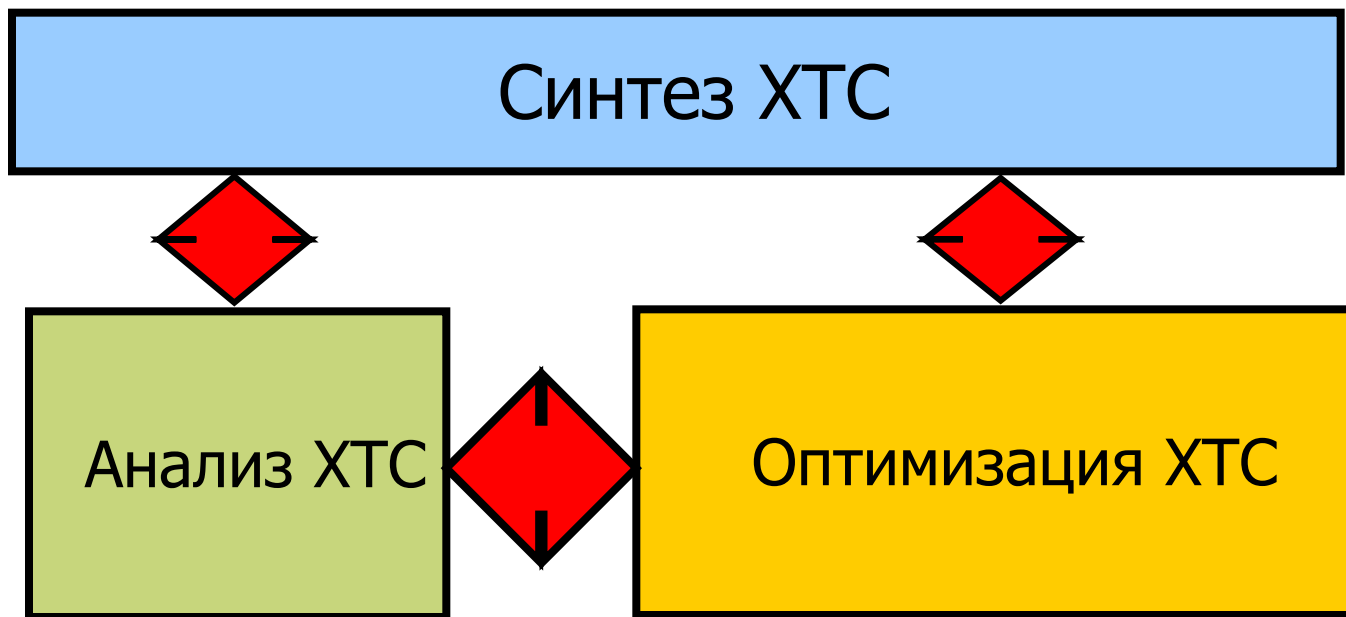
Ограничения Первого рода:

$$\bar{u}^{\min} \leq \bar{u} \leq \bar{u}^{\max}$$

Ограничения Второго рода:

$$\bar{\Psi}(\bar{x}, \bar{u}, \bar{a}) \leq 0$$

## §5. Применение компьютерных моделей химических процессов для анализа, оптимизации и синтеза химических производств (химико-технологических систем –ХТС).



Коэффициент эффективности химического производства – это количественный показатель качества функционирования ХТС, зависящий от собственно входных переменных, технологических параметров, конструкционных параметров, параметров характеризующих особенности технологической схемы производства, типовых аппаратов конкретных ХТП и физико-химических способов реализации процессов



# Анализ ХТС

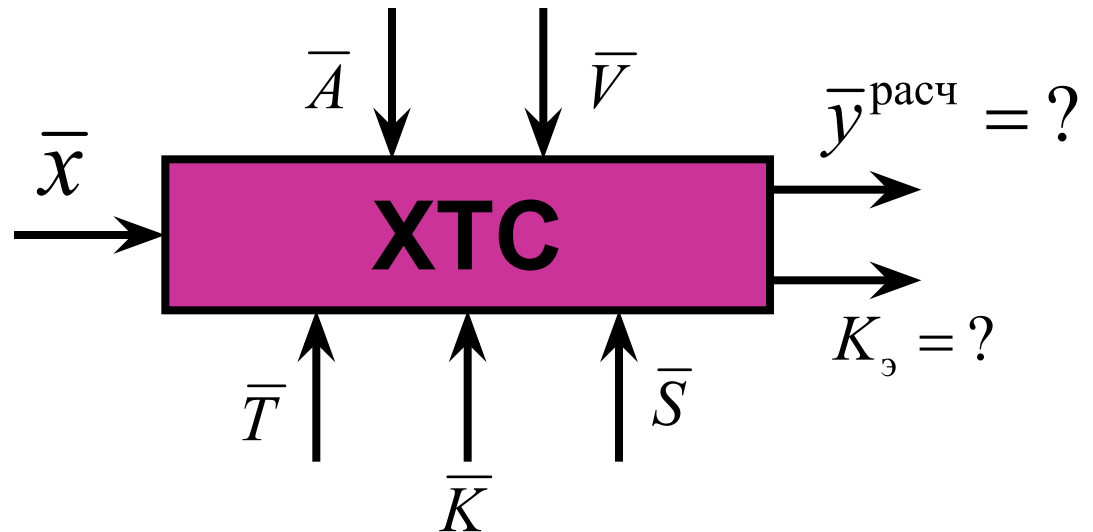
Анализ ХТС – это операция определения  $\bar{y}^{\text{расч}}$  и  $K_{\text{э}}$  при варьировании значений остальных переменных и параметров производства:

Дано:  $\bar{x}, \bar{T}, \bar{K}, \bar{S}$

Известно:  $\bar{V}, \bar{A}$

Определить:  $\bar{y}^{\text{расч}}, K_{\text{э}}$

Необходим: alg MM



# Оптимизация ХТС

Оптимизация ХТС – это операция определения оптимальных значений

$$\bar{T}^{opt}, \bar{K}^{opt}, \bar{S}^{opt}$$

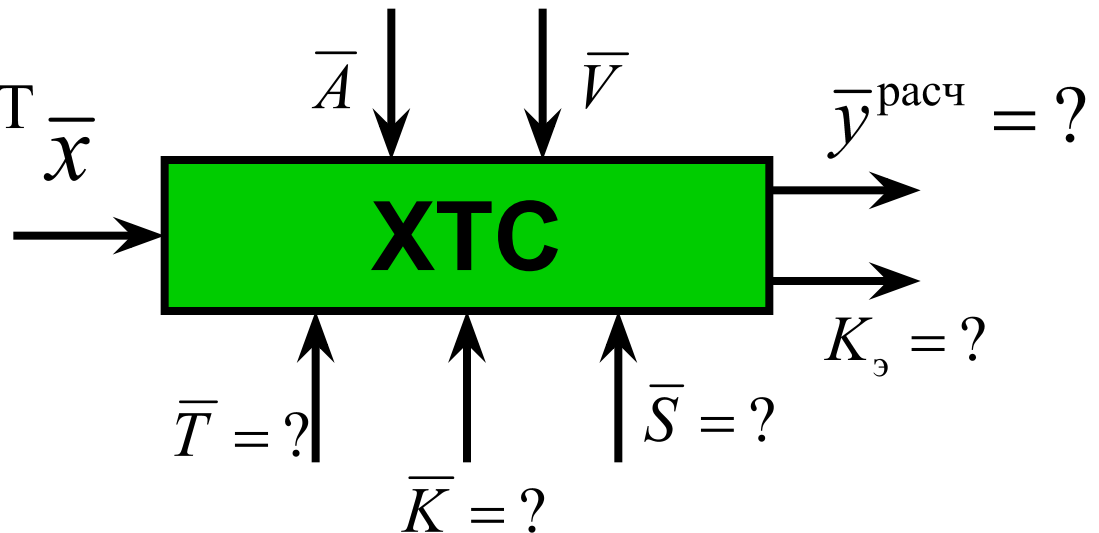
при известном виде выражения критерия оптимальности (целевой функции) и заданных значениях  $\bar{x}$ ,  $\bar{V}$ ,  $\bar{A}$

Дано:  $\bar{x}, \bar{V}, \bar{A}$

Известен:  $R$

Определить:  $\bar{T}^{opt}, \bar{K}^{opt}, \bar{S}^{opt}$

Необходимы: alg ММ, alg ОПТ  $\bar{x}$



# Синтез ХТС

Синтез ХТС – это операция создания ХТС для производства заданной химической продукции с учётом определённых требований к функционированию ХТС, а также различных физико-химических и технологических ограничений на их выполнение.

Дано:  $\bar{x}, \bar{y}$

Известны: физико-химические и технологические ограничения

Определить:  $\bar{V}^{opt}, \bar{A}^{opt}, \bar{T}^{opt}, \bar{K}^{opt}, \bar{S}^{opt}, \bar{y}^{расч}, K_s$

Необходимы: alg ММ, alg ОПТ,  
alg СИНТ

