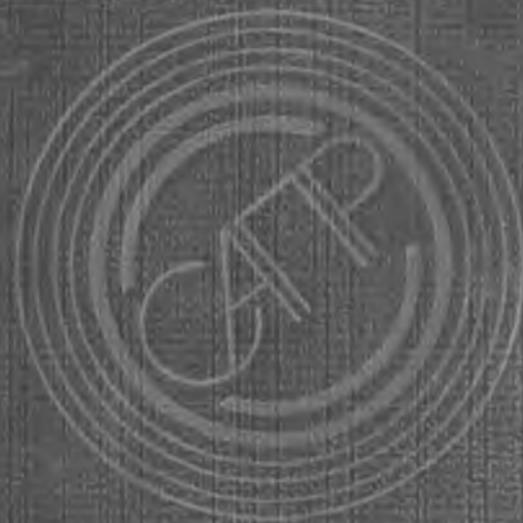


ОСНОВЫ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ
ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

В.В. КАФАРОВ
В.Н. ВЕТОХИН

В.В. КАФАРОВ В.Н. ВЕТОХИН

ОСНОВЫ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ



«НАУКА»

К-12 . АКАДЕМИЯ НАУК СССР
ОТДЕЛЕНИЕ ИНФОРМАТИКИ, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ
И АВТОМАТИЗАЦИИ

В.В.КАФАРОВ В.Н.ВЕТОХИН

ОСНОВЫ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

Ответственный редактор
член-корреспондент АН
И. М. МАКАРОВ



МОСКВА «НАУКА»

1987

терминологию, дать описание данных и их взаимосвязей. Основное внимание уделяется структуризации данных, выявлению взаимосвязей между ними без рассмотрения особенностей реализации. Концептуальная модель содержит не только описание данных, используемых в данной версии САПР, но и возможные пути расширения модели, установления дополнительных перекрестных ссылок между элементами данных. Этот этап проектирования базы данных является наименее формализованным, эффективное его решение зависит от квалификации разработчика (или администратора БД).

При разработке САПР многофункционального назначения перерабатываемая информация может быть самой разнородной, часто повторяющейся по ряду элементов для различных подсистем. Поэтому после сбора последней необходимо провести ее структуризацию, т. е. устранить дублирование собственно данных и взаимосвязей, выявить и исключить неоднозначность взаимосвязей между элементами данных и их атрибутами. По аналогии с реляционным представлением модели данных упорядочивание информации осуществляется (на этапе разработки концептуальной модели предметной области) н о р м а л и з а ц и е й отношений, состоящей в группировке данных в ряде отношений.

Данные в том виде, как они собраны и используются прикладными программами (ненормализованные), могут быть отображены на логическую модель и использоваться в дальнейшем. Но при этом, как уже отмечалось, возможно дублирование их, приводящее к усложнению прикладных программ поддержания и ведения базы, снижению эффективности работы БД.

Нормализация данных (рис. 5.14) проводится обычно за три шага [24]. На первом шаге исключаются повторяющиеся группы данных, на втором — выделяются ключи и зависящие от них атрибуты, на третьем — выделяются атрибуты, которые могут существовать независимо от остальных атрибутов этого отношения. Важным обстоятельством при выполнении нормализации является наличие единственного представления пользователя о предметной области, в частности относительно ключевых элементов, совокупности данных и их взаимосвязей. Следует заметить, что важность нормализации (как и ее необходимость) зависит от сложности взаимосвязей между данными, их разнородности. В технических приложениях данные обычно достаточно однородны и имеют четкие однозначные связи, поэтому выполнение всего цикла нормализации бывает излишним — достаточно корректного отбора данных с учетом прогноза на развитие системы.

Проектирование логической модели базы данных. Оно заключается в отображении концептуальной модели на логическую, поддерживаемую конкретной СУБД, а именно иерархическую, сетевую или реляционную. Поскольку эти модели различаются по структуре, то преобразование концептуальной модели должно



Рис. 5.14. Нормализация отношений между данными

сопровождаться соответствующими мерами по обеспечению адекватности представления. Наиболее естественно отображение выполняется для реляционной модели, если в основе построения концептуальной модели использовался реляционный подход к упорядочению данных и взаимосвязей между ними. Для других структур (иерархической или сетевой) при выполнении операции отображения необходимо прежде всего сформировать соответствующую обобщенную модель, в которую входит необходимая информация об объекте и связях, включая связи типа «один к одному», «один ко многим», «многие к одному» или «многие ко многим», однако без учета ограничений, накладываемых конкретной СУБД. После этого следует модифицировать полученную модель исходя из указанных ограничений и других соображений, связанных с производительностью системы [24].

Процесс разработки обобщенной модели базы должен предусматривать возможные пути дальнейшего расширения БД так, чтобы будущие нововведения не привели к необходимости полной замены модели. Искусство проектировщика состоит именно в том, чтобы составить модель, имеющую как можно более общий характер.

Кафаров В. В. Ветехин В. Н. Основы автоматизированного проектирования химических производств. М.: Наука, 1987.

Рассмотрены вопросы, связанные с теоретическими основами построения систем автоматизированного проектирования (САПР) и их практическим применением. Дана характеристика существующей практики ведения проектных работ, а также намечены пути автоматизации отдельных этапов проектирования в рамках САПР, информационного обеспечения, пакетов прикладных программ, обеспечения диалога. Приведены примеры практического применения подсистем проектирования.

Рассчитана на научных и инженерно-технических работников, специализирующихся в области проектирования САПР в химической и смежных отраслях промышленности.

Табл. 52, ил. 164, библиогр. 238 назв.

Рецензенты: Л. А. СЕРАФИМОВ, Н. Н. КУЛОВ

ПРЕДИСЛОВИЕ

Современное развитие науки и техники отличается практической направленностью исследований, ориентацией на создание технологий комплексного использования сырья и побочных продуктов, применение малоотходных или безотходных технологических процессов, интенсивной технологии. Решение поставленных задач невозможно без повышения эффективности использования научного потенциала на основе широкого внедрения средств вычислительной техники, метода математического моделирования и методологии системного анализа.

Интенсивный путь развития народного хозяйства, в частности, химической промышленности, диктует широкомасштабное применение современных технических средств и методов на всех этапах разработки проекта и в процессе эксплуатации. Длительность самого этапа проектирования в настоящее время достигает нескольких лет. И как часто спроектированное производство устаревает морально уже ко времени окончания проектирования, а к моменту ввода в эксплуатацию производство нуждается в реконструкции!

Необходимость пересмотра существующей практики проектирования является очевидной и находит свое выражение в развитии и внедрении автоматизированного проектирования как современного подхода к решению проектных задач во многих отраслях промышленности.

Современное химическое производство включает в себя самый разнообразный круг процессов, обусловленных протеканием различных по природе явлений как в гомогенных (газ, жидкость, твердое тело), так и в гетерогенных (газ—жидкость, жидкость—жидкость, газ—твердое тело и т. д.) условиях. Если учесть, что отдельные процессы протекают на различных энергетических уровнях с выделением или поглощением энергии, то становится очевидной необходимость, помимо тщательной проработки от-

дельных стадий производства, совместной увязки их по энергетическим и материальным потокам с целью получения оптимального варианта. И такая методология — методология системного анализа — должна применяться на всех этапах создания современного химического производства. Ее реализация при проектировании, разработке и эксплуатации систем управления невозможна без применения современных вычислительных средств.

В связи с этим неизмеримо возросло теоретическое и прикладное значение математического обеспечения. От эпизодического применения ЭВМ для решения проектных и исследовательских задач к полной компьютеризации на всех уровнях создания и эксплуатации производства — такова первоочередная задача развития научно-технического прогресса.

Основным путем повышения эффективности использования математического обеспечения для решения задач химической технологии является разработка и применение программно-машинных комплексов широкого доступа в области оптимизации, проектирования и управления. Применение таких систем повышает интеллектуальную вооруженность исследователя, позволяя в более короткие промежутки времени и на более высоком научном уровне принимать продуманные решения при анализе и, особенно, проектировании объектов химической технологии.

Производства химической, нефтехимической, нефтеперерабатывающей и смежных отраслей промышленности относятся к производствам с непрерывной технологией. В этом состоит их специфика и сложность. Детерминистско-стохастический характер протекания процессов, распределенность в пространстве и времени, сложная и неоднозначная взаимосвязь между пространственными и временными координатами внешних условий и внутреннего состояния системы — все это предопределяет необходимость поддержания динамического равновесия с помощью управляющих воздействий по отдельным параметрам процесса.

Недостаточная теоретическая проработка отдельных явлений выражается в установлении между множеством влияющих факторов закономерностей, основанных на интегральных (часто косвенных) параметрах и не отражающих количественно поведение процессов. Использование таких зависимостей, как основы

математических моделей, чревато, во-первых, опасностью неточного описания процесса (системы) при изменении внешнего (внутреннего) состояния, и, во-вторых, усложнением самой системы (производства) и системы управления ею.

Стратегия системного анализа при исследовании процессов и систем заключается в проведении фундаментальных поисковых работ на всех уровнях иерархии, установлении причинно-следственных связей между явлениями и процессами, которые будут положены в основу алгоритмов научных исследований, проектных разработок. Непрерывные технологические процессы слишком сложны, чтобы можно было использовать при проектировании их упрощенное математическое описание.

Поэтому создание систем автоматизированного проектирования (САПР) технологических процессов заключается не только в автоматизации процессов сбора, накопления и обработки информации, изготовления текстовой и графической документации (что само по себе существенно ускоряет сроки проектирования), но и (что более важно) в применении теории и методологии системного проектирования, заключающейся в комплексном рассмотрении проблемы с детализацией на каждом из уровней и учете взаимосвязей между ними. При этом математические модели, используемые на каждом из уровней и этапов проектирования, должны не только отражать состояние реального объекта, но и обладать прогнозирующими способностями.

Готовя монографию, авторы преследовали две равнозначные цели. Во-первых, ее содержание должно служить исходным материалом для специалистов, занятых системным анализом процесса проектирования, созданием на его основе теоретических предпосылок комплексной автоматизации проектных работ, практической реализацией алгоритмов принятия оптимальных проектных решений при расчете отдельных процессов и установок, автоматизацией изготовления проектной документации. Во-вторых, это попытка сбора и систематизации сведений о современной организации разработки технологической и других частей проекта химического производства (механической, строительной, электротехнической и т. д.), о рациональных внутренних связях между проектировщиками разных специальностей, о методологических подходах к созданию САПР, обеспечивающих требования технологии, строительства, информационного обеспечения.

Таблица 5.3

Этапы проектирования	Исходные данные	Результаты	Методы аналитического проектирования
Информационный анализ	Неформализованное описание предметной области	Концептуальная модель предметной области: атрибуты и связи между ними, состав, частота и структура запросов к базе	
Проектирование логической модели базы	Концептуальная модель предметной области; описание СУБД	Внешняя модель базы (иерархическая, сетевая или реляционная)	Моделирование, реляционный подход, программирование
Физическое проектирование базы	Концептуальная модель предметной области; описание СУБД; внешняя модель базы; вычислительная среда	Размещение базы данных в иерархической памяти вычислительной среды, оценка производительности БД	Программирование, кластерный анализ, теория массового обслуживания, имитационное моделирование
Сопровождение базы данных	Концептуальная модель предметной области; описание СУБД; внешняя и внутренняя модели модели базы; размещение базы в памяти вычислительной среды; параметры предметной области, СУБД и вычислительной среды	Расписание выполнения детерминированных запросов, моменты времени для реорганизации базы, оценка производительности БД	Программирование, теория массового обслуживания, имитационное моделирование

Физическое проектирование базы данных. Оно состоит в создании внутренней модели данных исходя из параметров вычислительной среды, в которой будет функционировать СУБД. На этом этапе логическая модель (реляционная, иерархическая или сетевая) связывается с вычислительной средой такими характеристиками, как размеры оперативной памяти, вид и размер внешней памяти, способы организации файлов записи и доступа, коэффициенты блокирования и т. д. Эффективность решения задач этого этапа определяется имеющимися вычислительными средствами, системным и предметным математическим обеспечением, методами доступа внутренней модели (физическим последовательным, индексно-последовательным, индексно-произвольным, прямым и т. д.). В общем случае выполнение запроса пользователя обеспе-

предоставляют СУБД, методы доступа внешней (ЯОД и ЯМД) и внутренней моделей, а также средства операционной системы.

Проектирование баз данных непрерывно связано с сопровождением их в режиме эксплуатации, в результате чего осуществляется оценка производительности и выявляются отдельные недоработки, которые могут потребовать модификацию созданных баз. Здесь может выявиться необходимость в реструктурировании (изменении логической структуры данных) и реорганизации (удалении отдельных физических записей) баз данных. Помимо этого исследуются потоки ссылок на данные, а также вопросы планирования вычислительного процесса. Основные этапы проектирования и сопровождения баз данных приведены в табл. 5.3 [25].

Банк данных является одной из подсистем САПР и нормальное его функционирование возможно при наличии активного взаимодействия с окружающей средой (подсистемами). В отличие от информационно-справочных систем данные, подлежащие хранению и выдаче по запросам, являются чаще всего результатом сложных расчетов по соответствующим алгоритмам обработки. Поэтому непременным элементом БД будет пакет прикладных программ, обеспечивающих расчет, ведение и выдачу необходимой информации.

Реализация БД на основе СУБД КВАНТ-М. Эта система работает под управлением операционной системы ОС-РВ на мини-ЭВМ СМ-4, имеет широкий набор интерактивных программ-утилит для управления файлами данных. Для изменения баз данных и контроля за их состоянием можно использовать интерактивный язык запросов КВАНТСКРИПТ-М. Характеристики системы по оперативной памяти: при обычной работе — 70 кбайт, при загрузке БД — до 192 кбайт; внешняя память — 2,5 Мбайт. Система обеспечивает одновременное выполнение нескольких пользовательских программ и поддерживает структуру баз данных, представленную на рис. 5.15, т. е. в терминах этой СУБД не имеют отражения не только сетевые структуры, но даже и иерархические, в которых имеется более двух уровней связей типа «один ко многим». Однако любое поле записи может быть объявлено ключевым, что позволяет адекватно отобразить в эту структуру различные обобщенные схемы с небольшой избыточностью. Кроме

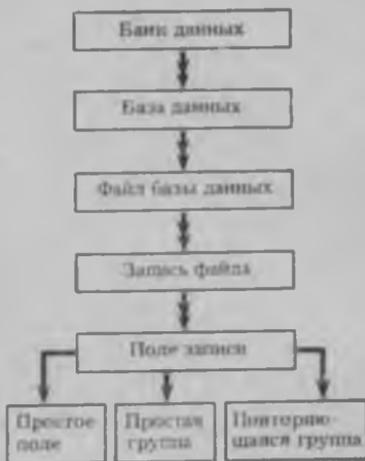


Рис. 5.15. Структура БД в терминах СУБД КВАНТ-М

При этом авторы исходили из желания дать по возможности обстоятельное описание проблем, связанных с проектированием химических производств и процессов, показать на фактическом материале задачи и способы решения вопросов создания САИР, показать практическое применение систем (и подсистем) в химической и нефтеперерабатывающей промышленности. Изложение материала основано как на собственном опыте работы в области автоматизации проектирования, так и на многочисленных публикациях по данной проблеме.

Авторы надеются, что книга будет полезна специалистам в области автоматизации проектирования, студентам и аспирантам вузов технологического профиля, специализирующимся в области создания САИР, и заранее выражают признательность за все замечания и пожелания, которые будут направлены в их адрес: 125820, Москва, А-47, Миусская пл., д. 9, Московский химико-технологический институт им. Д. И. Менделеева, кафедра кибернетики химико-технологических процессов.

В. Кафаров, В. Ветухин

I ПРОЦЕСС ПРОЕКТИРОВАНИЯ КАК ОБЪЕКТ АВТОМАТИЗАЦИИ

Глава I

СОСТАВ И СОДЕРЖАНИЕ ПРОЕКТНЫХ ДОКУМЕНТОВ

Современные крупнотоннажные химические производства отличаются многостадийностью получения целевых продуктов, сложностью технологических решений, высокой энергонасыщенностью и материалоемкостью, большой протяженностью и сложностью трубопроводных и кабельных коммуникаций, глубокой функциональной взаимозависимостью по материальным и энергетическим потокам отдельных стадий и отделений. В их состав, как правило, входят отделения подготовки сырья, химического превращения, выделения целевых продуктов и ряд вспомогательных систем, обеспечивающих бесперебойное протекание основного технологического процесса (энерго- и холодо-снабжения, приготовления и регенерации катализаторов, обезвреживания и удаления или переработки отходов производства, отопления и вентиляции, оборотного водоснабжения, компримирования, механической службы, автоматического управления и т. п.).

Для размещения основного производства, всех служб и коммуникаций возникает необходимость в создании специализированных зданий, трубопроводных эстакад и подземных сооружений большой протяженности. Проектирование, строительство и пуск такого производства связаны со значительными затратами денежных средств, материальных и трудовых ресурсов и поэтому должны вестись по проектам, обеспечивающим: а) реализацию последних достижений науки и техники, передового отечественного и зарубежного опыта, с тем, чтобы строящиеся или реконструируемые предприятия ко времени ввода в действие были технически передовыми и обеспечивали выпуск продукции высокого качества; б) внедрение высокопроизводительного оборудования, установок и агрегатов большой единичной мощности; в) рациональное использование природных ресурсов, комплексное использование сырья и материалов, организацию безотходной, энергосберегающей технологии производства; г) механизацию и автоматизацию производственных процессов, автоматическое управление производством (АСУ) и технологическими процессами (АСУТП).

Развитие химических производств характеризуется значительным усложнением самих технологических схем, созданием

энерготехнологических циклов, аппаратов сложных конструкций, работающих в условиях высоких давлений, температур и агрессивных сред. Проектировщику необходимо решать проблемы охраны окружающей среды, применения новых материалов, обеспечения надежности производства. Все это требует совершенствования самого процесса проектирования, повышения качества проектной документации, четкого определения совокупностей нормативных документов по отдельным стадиям проекта.

1.1. Нормативные документы и стадии проектирования

Существующая практика проектирования всего комплекса химического производства проводится в соответствии со следующими нормативными документами: а) инструкцией о составе, порядке разработки, согласования и утверждения проектно-сметной документации на строительство предприятий, зданий и сооружений, определяющая объем и содержание проекта; б) строительными нормами и правилами на разработку различных разделов проекта; в) правилами безопасности во взрыво- и пожароопасных химических и нефтехимических производствах; г) санитарными нормами проектирования промышленных предприятий; д) государственными стандартами; е) каталогами промышленных изделий и материалов; ж) единой системой конструкторской документации, совокупностью стандартов, определяющих содержание и форму представления результатов разработки новых видов оборудования; з) системой проектной документации для строительства, в соответствии с которой проводится оформление всех частей и элементов проекта вновь создаваемых и реконструируемых предприятий; и) положением об авторском надзоре.

Помимо указанных документов общего характера проектные организации в своей деятельности должны руководствоваться отраслевыми стандартами и стандартами, действующими в данной проектной организации.

Состав проекта. Проект современного химического производства является результатом интеллектуальных, творческих усилий целого ряда исследовательских, проектных, конструкторских и строительных организаций и объединений. И качество его зависит от того, насколько каждое из этих подразделений владеет современными методами проектирования, использует достижения научно-технического прогресса. При создании проекта приходится решать самый разнообразный круг проблем, относящихся к различным отраслям народного хозяйства, использовать достижения (технические, социальные, технологические) этих отраслей, увязывать их в единое целое для получения оптимальных решений. Сложность и многообразие задач, возникающих при проектировании, обусловили и многостадийность этого процесса.

Существующая практика проектирования широко использует принцип декомпозиции, в результате чего выделяются отдельные подзадачи, решение которых возлагается на специализированные подразделения в рамках проектной организации и различных отраслей промышленности. Анализируя процесс проектирования химических, нефтехимических и нефтеперерабатывающих производств, можно выделить следующие основные направления: технологическое проектирование; проектно-конструкторские разработки; строительное проектирование; составление смет и проектов производства работ.

К технологическому проектированию можно отнести разработку следующих частей проекта: а) собственно технологической; б) монтажно-технологической (механико-технологической); в) контроля и автоматики; г) теплотехнической; д) электротехнической; е) организации труда; ж) технико-экономической.

К проектно-конструкторским разработкам можно отнести: а) конструирование аппаратуры и оборудования; б) проектирование металлоконструкций для обслуживания аппаратуры и оборудования, а также систем для их монтажа и демонтажа; в) проектирование теплоизоляции аппаратуры и оборудования; г) подтверждение к использованию стандартного оборудования, материалов и комплектации.

К строительному проектированию традиционно относят разработку: а) строительной части зданий и сооружений; б) системы отопления и вентиляции, открытых помещений, обогрева полов; в) вертикальной планировки; г) сетей водоснабжения и канализации.

Составление смет и проектов производства работ охватывает разработку следующих разделов: а) смет на строительство (локальных и сводных); б) проекта организации монтажных работ; в) проекта организации строительных работ.

В соответствии с приведенной номенклатурой работ обычно выделяются функциональные подразделения (в рамках проектного института) и отдельные части проекта.

Технологическая — выполняет проработку регламента на проектирование и анализ вариантов технологических схем; расчет материальных балансов, конструктивных параметров аппаратов, технологических режимов; разработку номенклатуры оборудования, как стандартного, так и нестандартного; компоновку оборудования; разработку заданий смежным частям проекта. Технологическая часть проекта координирует деятельность всех смежных частей проекта в процессе выполнения работ путем консультаций, увязок и согласований, проводимых между смежными частями проекта, с внешними организациями, с контролирующими организациями и с заказчиком.

Монтажно-технологическая — разрабатывает компоновку оборудования, схемы пароспутников.

Генплан — разрабатывает генеральный план производства, вертикальную планировку, систему водоотвода, сводный план коммуникаций, ситуационные планы, план автодорожных и железнодорожных коммуникаций, схему земляных работ и расчеты их объемов, разрезы площадок, профили дорог, покрытия площадок.

Архитектурно-строительная — разрабатывает здания и сооружения производственного назначения, здания и сооружения культурно-бытового назначения, здания и сооружения административно-хозяйственного назначения, жилые здания.

Электротехническая — разрабатывает внешнее электроснабжение производства; магистральные силовые и осветительные сети производства; силовые и осветительные сети, электрооборудование и освещение общезаводских объектов; силовые и осветительные электросети; электрооборудование, освещение и сети автоматизации технологических установок; систему молниезащиты и защиты от статического электричества; систему диспетчеризации энергоснабжения производства; схему наружного освещения; систему охранного освещения; систему связи и сигнализации.

Водоснабжения и канализации — разрабатывает магистральные общезаводские сети водоснабжения и канализации и оборудования на них, внутренние сети водоснабжения и канализации и оборудования на них, очистные сооружения водоснабжения и канализации.

Теплотехническая — разрабатывает тепловые сети, сооружения и оборудование на них; блоки утилизации тепла; блоки химводочистки; паропроводы, сооружения и оборудование на них.

Отопления и вентиляции — разрабатывает систему отопления и вентиляции производственных и административно-хозяйственных помещений; систему обогрева полов, приборов, устройств и трубопроводов, располагающихся на открытых местах; систему горячего водоснабжения; систему продува электродвигателей; систему кондиционирования воздуха.

Механическая — разрабатывает аппараты колонного типа и оборудование как стандартное и повторно применяемое, так и нестандартное; материальные склады и оборудование для них; площадки и лестницы для колонн; трубопроводы для аппаратов колонного типа; газоходы и дымовые трубы к стандартным печам.

Контроля и автоматики — разрабатывает оптимальные схемы автоматизированного управления технологическими процессами, электроснабжением, теплоснабжением, канализацией и водоснабжением; систему учета затрат энергоресурсов предприятия (электроэнергии, пара, воды, реагентов, воздуха).

Технологического оборудования — осуществляет выбор оборудования по запросам смежных частей проекта.

Сметная — разрабатывает сметную документацию по отдельным видам работ и затрат (локальные сметы), отражающую стоимость приобретения оборудования и стоимость выполнения работ; сметную документацию по каждому титулу; сметную документацию по производству.

Технико-экономическая — разрабатывает технико-экономическое обоснование строительства (расширения) производства, предпроектные технико-экономические обоснования (например, перспективные планы), технико-экономические части проекта (рабочего проекта) производства, технико-экономические части проектов (рабочих проектов) установок и технико-экономические показатели к рабочей документации.

Общезаводская — разрабатывает состав проектируемого производства, технологическую схему, технические задания на проектирование для смежных частей проекта и сооружений общезаводского хозяйства (транспортных парков, межцеховых коммуникаций и т. д.).

В зависимости от сложности проекта отдельные части его могут объединяться (например, технологическая и механическая). Внедрение САПР в еще большей степени способствует интеграции отдельных частей проекта, поскольку с позиций системного анализа позволяет рассматривать весь процесс проектирования как единое целое. Соответственно меняются и нормативные документы, регламентирующие этапность разработки проекта.

Стадии проектирования. В нашей стране регламентировано выполнение проекта в одну стадию — рабочего проекта со сводным сметным расчетом стоимости — для предприятий, зданий и сооружений, строительство которых будет осуществляться по типовым и повторно применяемым проектам, а также для технически несложных объектов; в две стадии — проекта со сводным сметным расчетом стоимости и рабочей документации со сметами — для других объектов строительства, в том числе крупных и сложных.

Основными юридическими лицами, принимающими участие в разработке проекта, являются: заказчик, генеральный проектировщик (подрядчик) и соисполнители (субподрядчики), заводы по производству основного и вспомогательного оборудования, строительные, монтажные и пусконаладочные организации, а также организации и учреждения, отвечающие за эксплуатацию производства.

В качестве заказчика выступает министерство, ведомство или объединение. Заказчик формулирует основные требования к проектируемому объекту химической технологии, выдает исходные требования машиностроительным министерствам на изготовление сложного технологического оборудования с длительным циклом

изготовления для намечаемых к проектированию производств, на выполнение опытно-конструкторских работ по новому оборудованию, утверждает проектно-сметную документацию, производит финансирование работ, обеспечивает процесс проектирования, пуска и эксплуатации производства.

Заказчик несет ответственность за своевременную подготовку к эксплуатации и выпуску продукции вводимых в действие производств, ввод в эксплуатацию и освоение производственных мощностей, соблюдение финансовой дисциплины.

Генеральным проектировщиком является, как правило, проектная организация (институт), разрабатывающая технологическую часть проекта.

Институты, проектирующие химические, нефтехимические и нефтеперерабатывающие производства, обычно имеют одинаковую структуру, а именно, содержат подразделения трех типов: основные производственные, вспомогательные и обеспечивающие. Эти подразделения традиционно выделяются в соответствии с частями проекта.

Главное назначение основных производственных отделов заключается в разработке проекта на всех его стадиях. Сюда входят отделы: технико-экономических обоснований (ТЭО), механико-технологический (МТО), архитектурно-строительный (АСО), систем отопления и вентиляции (ОВ), электротехнический (ЭТО), внешних инженерных коммуникаций (ВИК), генеральных планов (ОГП), систем контроля и автоматизации (КИПиА), сметный. По существу, основной задачей каждого отдела является выполнение проектных работ соответствующей части проекта. В последнее время в институтах образованы отделы охраны окружающей среды, теплотехнические, САПР, макетного проектирования (ОМП), автоматизированных систем научных исследований (АСНИ).

Назначение вспомогательных отделов и служб заключается в подготовке, организации, обеспечении и контроле процесса проектирования, защите и согласовании проектов, финансировании проектных работ. К ним относятся: бюро главных инженеров (БГИ), технический отдел (ТО), планово-производственный отдел (ППО), отдел экспертизы проектов (ОЭП), бюро главного механика (БГМ), служба техники безопасности и промышленной санитарии, служба научно-технической информации (ОНТИ).

К обеспечивающим подразделениям относятся: отдел выпуска проектов, бухгалтерия, отдел кадров и др.

В разработке проекта участвует большинство подразделений (отделов) проектной организации, выполняющих различные части проекта. В практике проектирования химических, нефтехимических и нефтеперерабатывающих производств ведущими являются технологические подразделения (в частности, МТО), которые при выполнении большинства проектов осуществляют координацию работ всех частей. В процессе проектирования технологическое

подразделение выдает задания другим подразделениям проектной организации и внешним исполнителям.

В процессе решения собственных задач каждое подразделение, в свою очередь, выдает задания и осуществляет контакты с другими подразделениями проектной организации, а также со специализированными организациями. Таким образом, после получения задания каждое подразделение осуществляет активные внешние связи с другими подразделениями.

В качестве исполнителей генерального проектировщика выступают специализированные проектные и изыскательские организации, выполняющие отдельные части проекта или задания, научно-исследовательские институты (НИИ), специальные конструкторские бюро, а также опытные и серийные заводы, которые выполняют исследования.

Генеральный проектировщик по каждому проектируемому производству назначает главного инженера, ответственного за правильность принимаемых научно-технических решений, сроки выполнения и технико-экономические показатели разрабатываемого проекта. Он отвечает и за проект в целом, координирует деятельность всех подразделений. Проблема координации деятельности, увязки интересов всех подразделений является весьма сложной задачей в связи с противоречивостью частных технических интересов подразделений. Специализированные проектные организации также назначают главных инженеров проекта, ответственных за свой раздел проекта.

Технологические процессы, оборудование, материалы и приборы, впервые примененные или разработанные в проекте (рабочем проекте), должны проверяться проектными организациями-разработчиками на патентноспособность и патентную чистоту.

Проектные организации и их должностные лица несут ответственность за экономичность, надежность, безопасность, долговечность запроектированных объектов, полноту и эффективность предусмотренных в проекте мероприятий по охране здоровья трудящихся и окружающей среды, за соответствие мощностей и других технико-экономических показателей введенных в эксплуатацию производств мощностям и показателям, предусмотренным проектом.

Научно-исследовательские институты, подключаемые в качестве исполнителей при разработке проекта, формируют исходные данные на проектирование. Эти данные непосредственно связаны с организацией технологического процесса получения целевых продуктов на проектируемом производстве и характеризуют принятые технологические решения по способам реализации процессов, используемому оборудованию, сырью, режимным параметрам и т.д. Источниками данных обычно являются результаты математического моделирования и экспериментальных исследований на лабораторных, пилотных или полупромышленных уста-

повках. При реконструкции производства большая часть исходных данных получается на основе анализа результатов эксплуатации действующего производства.

НИИ несет ответственность за соответствие исходных данных для проектирования достижениям научно-технического прогресса в области новых технологических процессов, оборудования и материалов. Аналогично субподрядные организации несут ответственность за качество разрабатываемых ими проектных решений и их соответствие заданию на проектирование.

1.2. Организация проектных работ

Решение о создании нового или расширении (реконструкции) действующего производства принимается на основе утвержденных в установленном порядке схем развития и размещения отраслей народного хозяйства и отраслей промышленности, схем развития и размещения производительных сил по экономическим районам и союзным республикам, разработанных на период не менее 15 лет (по пятилеткам). Эти схемы через каждые 5 лет уточняются на основе всестороннего анализа совокупности материалов, характеризующих научно-технический уровень, экономические показатели и социальные аспекты.

Основанием для начала проектных работ является задание на проектирование, разрабатываемое заказчиком с привлечением генерального проектировщика на этапе подготовки к проектированию (рис. 1.1). Это задание разрабатывается на основе материалов и расчетов, выполненных для данного производства в составе схемы развития и размещения соответствующей отрасли народного хозяйства и отрасли промышленности, а также на основании акта по выбору района строительства.

Территориальное размещение объекта химической технологии является важнейшим фактором, влияющим на экономическую эффективность результатов проектирования. Ответственным за организацию выбора района строительства производства является заказчик проекта. Проектная организация с привлечением в необходимых случаях специализированных проектных и исследовательских организаций получает все требуемые данные для анализа и технико-экономического сравнения различных вариантов размещения производства с целью выбора оптимального. Исходной информацией для такого выбора являются следующие данные: количества и источники сырья и топлива; размещение рынков сбыта готовой продукции; количество и качество имеющейся технологической воды; потребность в энергии (электрической и тепловой); требуемые размеры строительной площадки с учетом перспективы расширения производства; потребность в рабочей силе (по квалификациям) и возможность их подготовки в районе будущего строительства объекта; количество и состав отходов, подле-

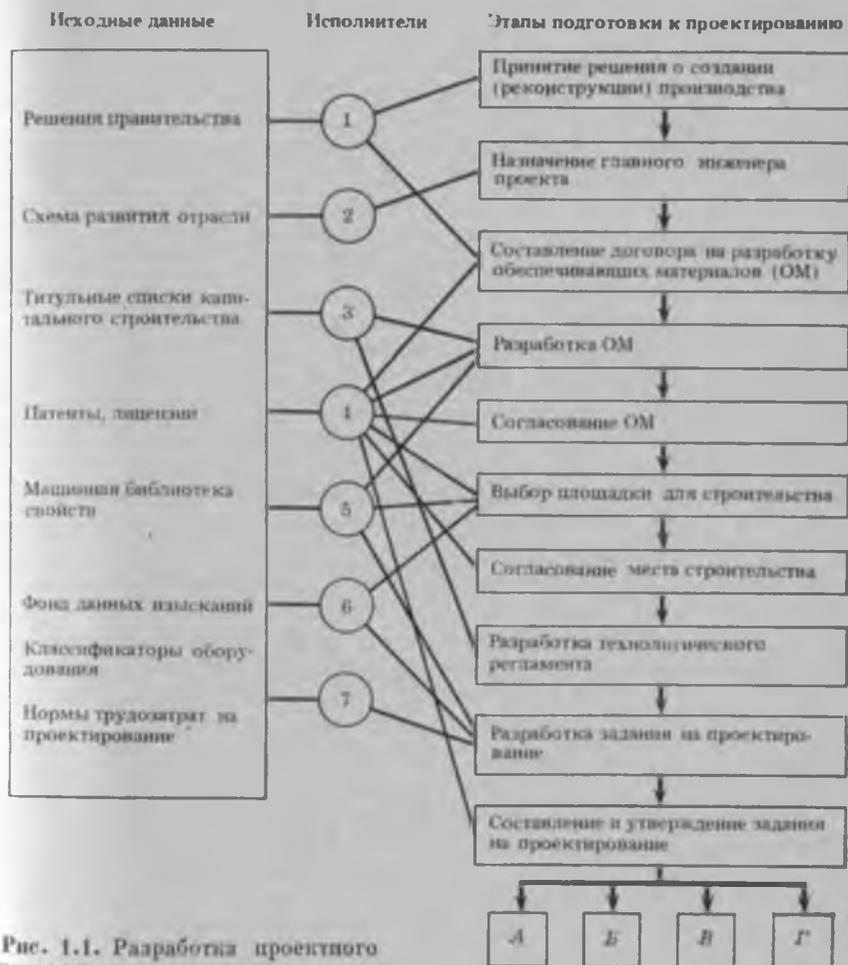


Рис. 1.1. Разработка проектного задания

1 — руководство министерства (ведомства); 2 — руководство проектного института; 3 — исследователи; 4 — главный инженер проекта; 5 — проектировщики; 6 — изыскатели; 7 — завод-заказчик; А — задание на проектирование; Б — включение в тематический план; В — договор на проектно-изыскательские работы; Г — акт выбора площадки

заводов удалению, и способы их обезвреживания. Естественно, необходимо учитывать расходы на доставку сырья и перевозку готовой продукции к рынкам сбыта. Вопрос выбора района строительства объектов химической технологии является общегосударственной проблемой, и он решается на основании планов развития и размещения производств химической промышленности с учетом экономических, демографических, экологических аспектов.

Задание на проектирование содержит исходные данные и показатели, предусмотренные в соответствующих планах развития, а именно: номенклатуру и объем производства (производительность, номенклатуру продукции, проектную мощность); требования по механизации и автоматизации производственных процессов, автоматизации управления технологическими процессами и производством; исходные положения для разработки мероприятий по защите окружающей природной среды; прогрессивные удельные показатели по эффективности капитальных вложений, материалоемкости и трудоемкости строительства, которые должны быть достигнуты в проекте (рабочем проекте), а также задания по экономному расходованию сырьевых, материальных и энергетических ресурсов, использованию научно-технических достижений в области технологии, оборудования, материалов, по утилизации отходов производства и вторичному использованию энергоресурсов, по росту производительности труда; задание по основным технико-экономическим показателям проектируемого производства; сроки начала и окончания строительства; внешние транспортные связи; наименование генерального проектировщика и строительномонтажной организации.

Вместе с утвержденным заданием на проектирование заказчик выдает проектной организации ряд других утвержденных документов, таких, как акт о выборе строительной площадки; архитектурно-планировочное задание и строительный паспорт, содержащий сведения о существующей застройке участка, подземных и наземных коммуникациях и др.; технические условия на присоединение проектируемого объекта к источникам снабжения, инженерным сетям и коммуникациям; перечень необходимых для проектирования материалов по виду выделяемого топлива, по месторождениям сырья; данные по оборудованию индивидуального изготовления и импортному; отчеты по выполненным научно-исследовательским работам и т. д.

Сложность разработки проекта (рабочего проекта) состоит в необходимости выполнения огромного числа работ самого различного профиля и, естественно, различными по специализации и квалификации проектировщиками. Однако все эти работы должны быть взаимосвязаны общей целью — созданием проекта, отвечающего требованиям времени. В связи с этим между отдельными частями проекта (и соответственно между подразделениями и исполнителями) возникает множество информационных связей самого различного характера, которые можно в первом приближении разделить на три типа. Первый тип связей соответствует информации, поступающей от других частей проекта и внешних организаций в виде заданий на проектирование, консультаций, согласований, утверждений, чертежей, схем, пояснительных записок и т. д. Второй тип связей включает информацию, циркулирующую в пределах отдельной части проекта между элементами

части (группами проектировщиков) в виде чертежей, пояснительных записок, смет, спецификаций и т. п. И, наконец, третий тип связей включает информацию, поступающую из информационного фонда в виде предшествующих проектных решений, патентной информации, опыта эксплуатации производств и др. Сложность использования всей совокупности информации при проектировании заключается не только в ее многообразии и разнотипности, но и в несвоевременности ее поступления. В качестве примера можно отметить, что при разработке технологической части нефтеперерабатывающего комплекса количество выполняемых работ равно 158, а количество связей — 1149. Ясно, что при традиционном проектировании очень сложно не только учесть, но и оценить такой объем данных. Это можно сделать лишь при использовании развитых САПР, а в большинстве случаев проектировщики идут по пути упрощения задачи путем априорного отсеивания части связей на основе опыта и интуиции.

Начальным этапом процесса разработки проекта (рабочего проекта) химического (нефтехимического или нефтеперерабатывающего) производства после получения задания на проектирование и технологического регламента является выполнение укрупненной и обобщенной модели проектируемого объекта. Этот этап осуществляется специалистами высокой квалификации и характеризуется принятием решений, в основе которых лежат опыт и интуиция проектировщика. В результате появляется укрупненная принципиальная схема технологического объекта, выявляется номенклатура основных блоков и узлов, определяются материальные связи между блоками, определяется последовательность технологической проработки блоков и узлов (рис. 1.2).

Следующим этапом является проработка вариантов технологических схем отдельных блоков по укрупненным показателям. Для каждого варианта определяются возможности реализации процессов и регулирования ими, проводятся прикидочные расчеты и осуществляется отсев нереализуемых или неэффективных вариантов технологических схем. Для оставшихся вариантов (в практике проектирования их количество весьма ограничено) начинается разработка технологической схемы, включающей расчет материальных и тепловых балансов, определение конструктивных и режимных параметров основных аппаратов, расчет основных технологических трубопроводов.

Важно отметить, что при выполнении как этого этапа, так и последующих необходимо ориентироваться на использование типовых проектных решений на базе унификации технологических и конструктивных комплексов, а также на широкое применение типовых проектов. Для производств с часто меняющейся технологией должно применяться универсальное оборудование, позволяющее без значительных дополнительных затрат приспособить его к новой технологии или номенклатуре продукции.

того, для каждого файла можно иметь множество подсхем, ориентированных на различные приложения [26].

Ранее отмечалось (см. гл. 4), что применительно к решению задач технологического проектирования целесообразно выделить следующие базы данных: стандартное и нормализованное технологическое оборудование; физико-химические свойства отдельных компонентов и их смесей; технологические схемы химических производств; источники данных.

Естественно, при расширении функций САПР потребуются расширить набор баз (например, включить материалы, экономические показатели, трубопроводы, приборы для контроля и управления и т. д.), однако принципиального отличия в формировании новых баз данных по сравнению с рассматриваемыми не следует ожидать.

Этапы проектирования концептуальной и логической моделей баз данных при разработке узкоспециализированных банков практически неразделимы и определяются функциональным назначением САПР. Поэтому обычно состав баз формируется достаточно просто. Трудности связаны с разработкой обобщенных схем баз с тем, чтобы последующее расширение их не привело к необходимости полной замены схемы.

Информационная модель технологического оборудования содержит следующие данные: а) вид оборудования; б) тип оборудования; в) ГОСТ или нормативы на соответствующее оборудование; г) данные, характеризующие единицу оборудования. В соответствии с этим предлагаемая обобщенная схема базы данных «Технологическое оборудование» приведена на рис. 5.16. Из рисунка следует, что такая схема не ограничивает количество и вид характеристик, поэтому для различного оборудования можно хранить различные данные. Для обеспечения свободы выборки характеристик в схеме выделяются ключевые поля (выделены звездочками на рисунке).

Гораздо сложнее информационная модель физико-химических свойств компонентов и смесей. Эта модель должна содержать данные о свойствах отдельных веществ, причем как в виде таблиц, так и аппроксимационных зависимостей свойство— (T) . Кроме того, для описания условий фазового равновесия (см. гл. 4) необходимо учитывать неидеальность фаз; в частности, неидеальность жидкой фазы может описываться с помощью моделей Вильсона, НРТЛ и т. д. Для этого необходимы бинарные равновесные данные, которые хранятся в виде таблицы «Состав первого компонента—состав второго компонента—температура—давление», а также в виде вектора параметров соответствующих уравнений.

Обобщенная схема базы данных физико-химических свойств представлена на рис. 5.17. На этой схеме не представлены связи, которые делают структуру сетевой, например определение одного свойства компонента через другое. Заранее предсказать возможные

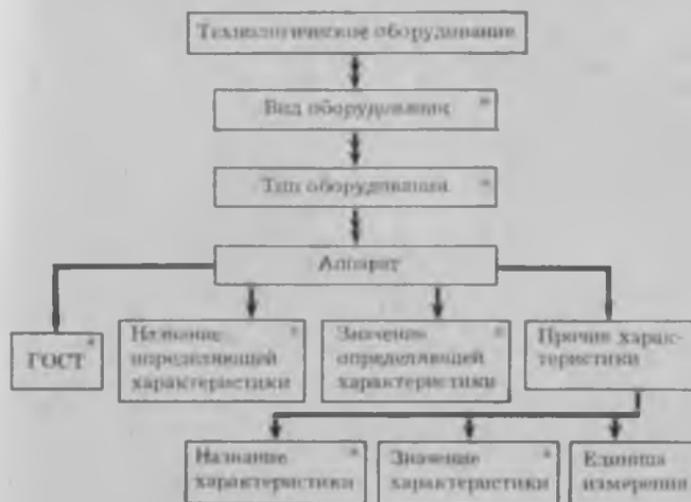


Рис. 5.16. Обобщенная схема базы данных «Технологическое оборудование»

ссылки трудно, да в этом и нет необходимости. В дальнейшем будет показана возможность решения этой проблемы при отображении схемы на файлы СУБД. Следует заметить, что некоторые поля могут отсутствовать; например, если принять, что все данные в базе представляются в системе СИ, то нет необходимости в поле «Единица измерения».

Информационная база «Технологические схемы» строится исходя из следующих предположений. Будем считать технологические схемы состоящими из типовых элементов, соединенных потоками. К типовым элементам относятся аппараты и соединительная арматура, потоки могут быть различной природы — материальные, энергетические, информационные и т. д. Каждый элемент характеризуется набором входных и выходных потоков, методом расчета выходных через входные. Ему присваивается определенный номер. Поток также имеет номер и целый набор свойств (скорость, температуру, состав, давление и т. д.). Сама технологическая схема имеет ряд входных и выходных потоков, связанных только с одним типовым элементом. Обобщенная модель технологической схемы, обладающая сетевой структурой, приведена на рис. 5.18.

Информационная модель базы «Литературные источники», представленная на рис. 5.19, достаточно простая по структуре.

Физическое отображение обобщенных схем осуществляется в терминах конкретной СУБД и должно обладать полнотой и минимальной избыточностью. Полностью избежать избыточности удается редко, так как СУБД обычно поддерживает только одну структуру, в то время как разработанные схемы могут относиться

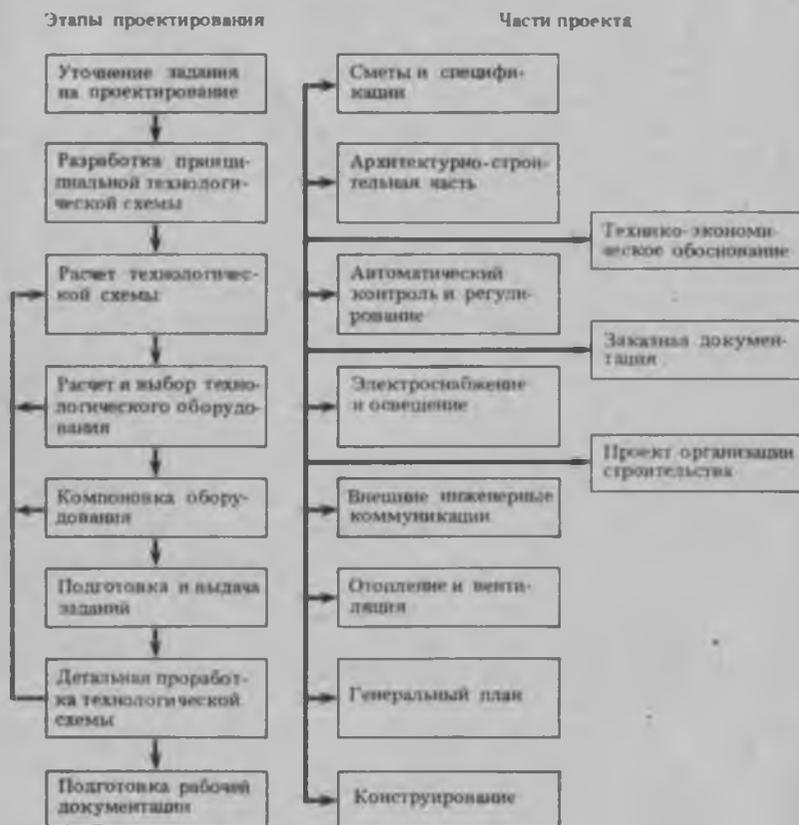


Рис. 1.2. Последовательность разработки проекта

После завершения работ по предварительному выбору технологической схемы дается задание на разработку генплана, в соответствии с которым одноименная часть проекта осуществляет размещение установок как в плане, так и по высоте.

На следующем этапе осуществляется проработка аппаратов, состоящая из расчетов конструкционных размеров, расчетов вспомогательного оборудования, расположенного вне аппаратов, из разработки схемы регулирования и проработки вопросов пуска и останова. На этом этапе составляются предварительные сметы и спецификации. В процессе выполнения работ выдаются задания другим частям проекта.

В соответствии с заданиями монтажно-технологическая часть проекта выполняет проект обвязки аппаратов трубопроводами; часть проекта «отопление и вентиляция» осуществляет выбор оборудования, необходимого для нормального функционирования ап-

паратов и создания условий для работы обслуживающего персонала в помещениях; электротехническая часть проекта производит предварительный расчет электронагрузок и определяет ориентировочные габариты электропомещений. Теплотехническая часть проекта, получив задание, выполняет увязку расходных показателей и разработку тепловых схем по каждому теплоносителю, выбор оборудования и предварительный расчет трубопроводов; часть проекта «водоснабжение и канализация» реализует увязку расходных показателей подачи и сброса воды, трассировку сетей водоснабжения и канализации и, наконец, расчет схем водоснабжения. Используя информацию, полученную от части проекта «генплан», и в соответствии с заданием, полученным от технологической части проекта, архитектурно-строительная часть выполняет выбор основных решений по конструкциям, сооружениям и фундаментам. Аналогично и все остальные части проекта выполняют возложенные на них функции. Как уже отмечалось, в выполнении частей проекта могут участвовать и специализированные проектные организации, а также НИИ, конструкторские бюро и т. д.

Как уже отмечалось, выполнение работ каждой из частей проекта тесно увязано информационными потоками с другими частями. Поэтому выполнение графиков разработки проектов полностью определяется своевременностью и оперативностью обмена данными между подразделениями. Малейшее нарушение сетевого графика выполнения работ приводит к задержке и срыву планов многих подразделений. Характер информационных связей для одной из частей проекта приведен на рис. 1.3.

Следующим этапом работы технологической части проекта является создание детализированной технологической схемы и разработка общей принципиальной схемы управления.

После завершения работ названного этапа оказывается возможным приступить к предварительной компоновке оборудования, включающей определение мест подвода материальных и энергетических потоков, обвязку оборудования, определение геометрических характеристик местонахождения оборудования, высотного расположения штуцеров, люков и обслуживающих площадок. В процессе выполнения работ по компоновке оборудования выдается задание механической части проекта на проработку конструкции, в ходе которой производится выбор конструкционного и материального оформления аппаратов (с учетом исходных данных, полученных от НИИ), осуществляются необходимые расчеты, изучаются возможности транспортировки и монтажа. После завершения рассматриваемого этапа возможна корректировка технологической схемы, что означает возврат к выполнению начальных этапов проектирования с использованием новой входной информации. Если же нет необходимости во внесении изменений в технологическую схему, то приступают к детальному механи-

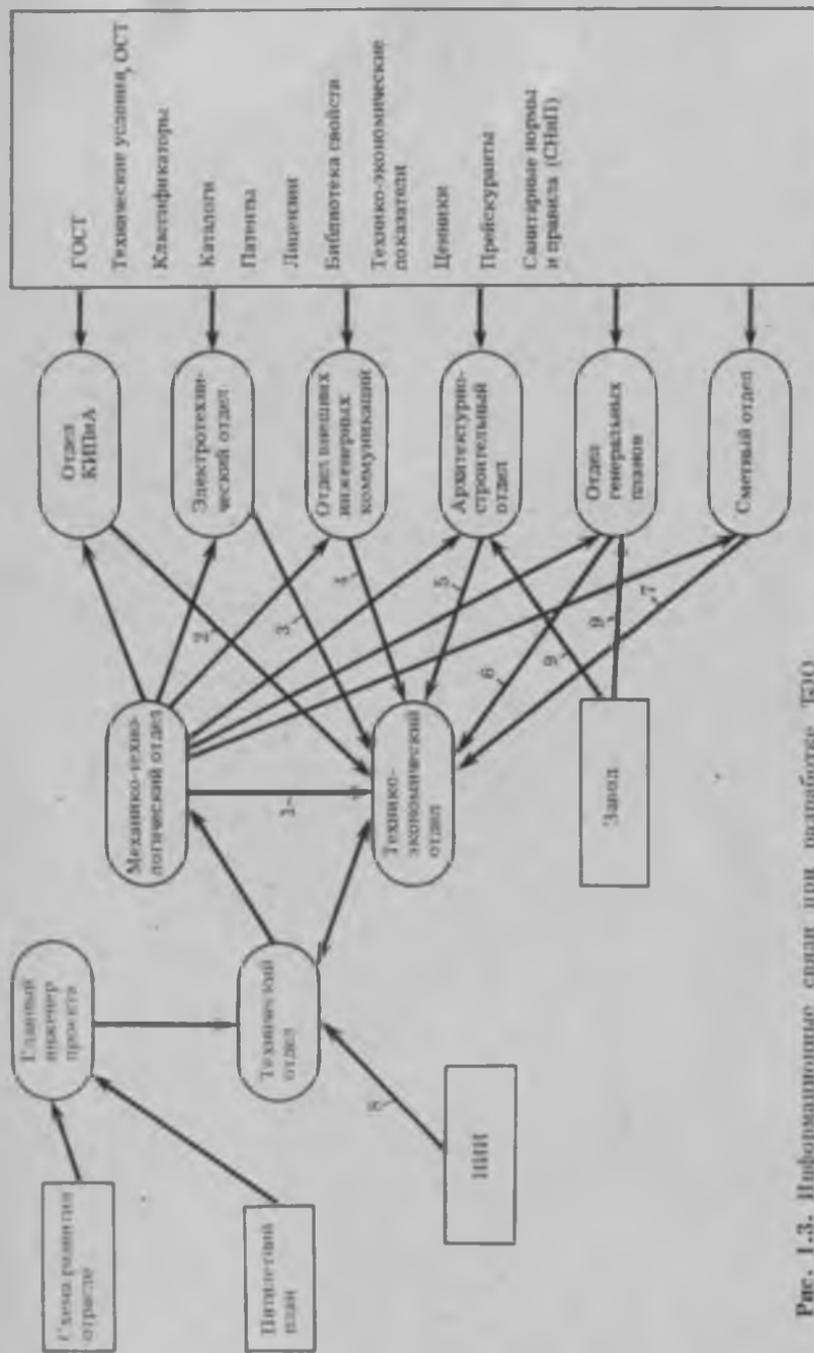


Рис. 1.3. Информационные связи при разработке ТЭС

1 — перечень оборудования, расходуемых коэффициентов, типовые устройства; 2 — перечень приборов системы автоматического регулирования; 3 — электрические нагрузки, функциональные трансформаторных подстанций и распределительных устройств; 4 — потребность в паре, масле; 5 — объемно-планировочные решения, потребность в материалах; 6 — потребность в территориях, транспорте; 7 — стоимостные данные; 8 — технико-экономические решения; 9 — сведения о строительных-монтажных организациях

ческому расчету аппаратов, включая кинематические расчеты на прочность, конструкционную проработку накладных деталей, расчет изоляций и составление спецификаций. Параллельно с названными работами механической и технологической частей проекта выполняют свою номенклатуру работ остальные части проекта в направлении дальнейшей детализации и углубления проработок. Заканчивается работа технологической (механико-технологической) части проекта окончательной компоновкой оборудования. В процессе выполнения этого этапа уточняется трассировка трубопроводов и обвязка аппаратов, геометрия аппаратов, расположение штуцеров, приборов, люков и обслуживающих площадок, уточняются и корректируются задания другим частям проекта: монтажно-технологической, архитектурно-строительной и т.д. При этом может возникнуть необходимость в корректировке первоначальной технологической схемы и соответственно в повторном выполнении работ, включенных в первоначальные этапы проектирования. Завершается проектирование составлением смет по спецификациям.

Аналогичная последовательность работ выполняется для каждого варианта технологической схемы, в результате чего выбирается наилучший. Следует отметить, что отсеивание некоторых вариантов может происходить при выполнении любого из этапов проектирования.

1.3. Содержание проекта

Проект (рабочий проект), разработанный проектной организацией, передается заказчику для последующего утверждения в установленном порядке. После утверждения он является основанием для планирования и финансирования строительства этого объекта, заказа основного оборудования, а также заключения договора подряда на капитальное строительство.

Содержание проекта (рабочего проекта) регламентируется соответствующими нормативными документами и излагается в нескольких разделах. При двухстадийном проектировании проект состоит из семи разделов, а при одностадийном — из четырех.

Проект содержит следующие разделы: общую пояснительную записку; технологию производства; строительные решения; организацию строительства; жилищно-гражданское строительство; сметную документацию; паспорт проекта. В рабочем проекте отдельные разделы объединены.

Общая пояснительная записка проекта содержит краткую характеристику всех частей и выходные данные по каждой из них. Это данные по технологии (сырьевая база, номенклатура, качество и технический уровень продукции, сведения о потребности в топливе, воде, тепловой и электрической энергии, трудовых ресурсах и т. д.); экономические показатели

в сравнении с лучшими показателями аналогов; решения и показатели по генеральному плану, транспорту, эффективности капитальных вложений и используемым достижениям науки и техники; проектные решения по комплексному использованию полезных ископаемых, отходов производства, вторичных энергоресурсов; мероприятия по охране окружающей природной среды и т. д. В графической форме приведены чертежи ситуационного плана размещения предприятия и схемы генерального плана.

Раздел «Технология производства» содержит детальную характеристику принятых технологических решений, их соответствие достижениям в области технологии, оборудования и материалов, обоснования численности производственного персонала; решения по вопросам тепло- и энергоснабжения, автоматизации управления процессами и производством и т. д. В этом разделе даются чертежи технологических схем, компоновки оборудования, грузопотоков, электроснабжения и т. д.

Раздел «Строительные решения» содержит краткое описание и обоснование решений архитектурно-строительных, по снижению производственных шумов и вибраций, бытовому и санитарному обслуживанию работающих и т. д. В виде чертежей приводятся планы, разрезы и фасады сооружений, схемы трасс инженерных и транспортных коммуникаций.

Сметная документация содержит данные по стоимости проектируемых предприятий в виде сметных расчетов, входящих в проект (рабочий проект) и в состав рабочей документации.

Рабочая документация для строительства предприятия содержит рабочие чертежи, разрабатываемые в соответствии с требованиями государственных стандартов; сметы с оценкой строительной стоимости; ведомости объема строительных и монтажных работ; ведомости и сводные ведомости потребности в материалах; спецификации на соответствующие виды оборудования.

При разработке рабочей документации заказчик передает проектной организации всю необходимую информацию по оборудованию индивидуального изготовления, в том числе по оборудованию единичного изготовления, головному образцу и импортному оборудованию.

Проектирование по сути ориентировано на создание перспективной продукции, материалов, оборудования и т. д. Поэтому закладываемая в проект технология, используемые методы строительства должны не только соответствовать современному уровню технического прогресса, но и отвечать прогнозам перспективного развития данной отрасли промышленности.

Существующая практика проектирования не позволяет отразить все многообразие связей между различными частями проекта и соответственно между исполнителями. Даже автоматизация

проектных работ на каждой из стадий проектирования не дает ожидаемого эффекта. Поэтому существующая организация процесса проектирования нуждается в существенной перестройке. Этого требует как теория системного анализа, так и современное состояние в области вычислительной техники и математического моделирования.

Для повышения эффективности процесса проектирования и проектных разработок необходимо: а) создание методологии автоматизированного проектирования на основе принципов системного анализа, что приведет к изменению как структуры проектной организации, так и научной базы; б) техническое перевооружение проектных организаций на основе вычислительной техники, внедрение ЭВМ на всех этапах разработки проекта; в) подготовка и переподготовка специалистов в области автоматизированного проектирования; г) обеспечение более тесного взаимодействия между исследовательскими, экспериментальными и проектными работами.

Процесс проектирования необходимо организовать таким образом, чтобы проектировщик в основном занимался проработкой различных вариантов проектных решений, а не изготовлением чертежей и другой документации. Решение указанных задач призваны обеспечить САИР, АСИИ, АСУ, в перспективе объединенные в интегрированную автоматизированную систему на базе распределенных вычислительных сетей индивидуальных и коллективных пользователей.

МЕТОДОЛОГИЯ АВТОМАТИЗАЦИИ ПРОЕКТИРОВАНИЯ
ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

Процесс проектирования химических производств как объект автоматизации представляет собой сложную кибернетическую систему по сбору и целенаправленной переработке входной научно-технической информации для проектно-конструкторских разработок в выходную информацию в виде проекта нового производства. При этом отличительной особенностью полученных результатов проектирования является то, что они, по существу, играют лишь роль прогноза, достоверность которого будет подтверждена (опровергнута) после воплощения объекта в металле. От того, насколько проработана и адекватно воспроизводится на этапе проектирования технология, насколько совершенно оборудование, средства анализа, контроля и управления, и будет зависеть реальность проектных решений.

Развитие химических производств характеризуется значительным усложнением самих технологических схем, созданием энерготехнологических циклов, совмещенных технологий, аппаратов сложных конструкций, работающих в условиях высоких давлений, температур и агрессивных сред. Проектировщику необходимо решать проблемы охраны окружающей природной среды, применения новых материалов, рассчитывать параметры надежности оборудования.

Все это качественно затрудняет работу проектировщика, требует проведения все большего числа расчетов, принятия решений по вопросам, не до конца изученным. Однако современное химическое производство слишком сложное, громадное и дорогостоящее, чтобы иметь возможность его разработки в натурных условиях. Поэтому расчет остается основным методом проектировщика, необходимо лишь постоянное его совершенствование.

Решая проектные задачи, специалисты уже давно начали расчленять процесс проектирования на отдельные стадии, а стадии, в свою очередь, на отдельные проектные операции. По мере усложнения проектируемых объектов изменялись также и приемы проектирования. Появился макетный метод, позволяющий, по существу, вести непрерывный синтез всего объекта, качественно оценивать большое количество параметров проектируемого производства (компоновку оборудования, строительные решения, удобство эксплуатации и т. д.). Вместе с тем количество работ по доводке объекта после его строительства не снижается, и затраты на эти работы уже не компенсируются ни совершенствованием приемов проектирования, ни увеличением численности занятых в проектировании людей. Необходимо кардинальное изменение методологии проектирования.

Проектирование, основанное на аналогии, опыте и интуиции проектировщика с привлечением ЭВМ для решения частных

проектных задач, не позволяет в должной степени реализовать в народном хозяйстве достижения научно-технического прогресса. К основным недостаткам этого подхода можно отнести следующие: а) не всегда используются новейшие достижения науки и техники в области технологии и организации строительства в силу сложности поиска и анализа соответствующих разделов научной информации; б) недостаточно прорабатываются вопросы повышения производительности труда и снижения расходов материальных и энергетических ресурсов в силу сложности анализа всего многообразия технологических и иных проектных решений, что приводит к необходимости доработки на действующих производствах проектных решений; в) невозможность просмотра альтернативных вариантов организации технологического процесса и соответственно выбора оптимальных решений; г) отсутствие оптимизации функционирования отдельных процессов и тем более производств в целом, что затрудняет возможность создания рециклических схем и схем с использованием вторичных материальных и энергетических ресурсов; д) неоправданно завышается объем проектно-сметной документации; е) невозможность сбора, обработки и учета статистики отказов оборудования, что не позволяет гарантировать надежность функционирования технологической схемы; ж) длительные сроки проектирования и выхода на проектную мощность не позволяют создавать производства, отвечающие уровню развития технологии к моменту освоения производства; з) система инженерных расчетов, излагаемая в методических рекомендациях по проектированию, обычно базируется на упрощенных методиках и не предусматривает широкого применения экономико-математических методов. При этом рекомендуемые методы проектных расчетов не предусматривают совместного решения смежных задач, а окончательный вариант проекта принимается на основе аналогий и опыта проектировщика.

Проектировщик должен иметь возможность предварительной проработки нескольких вариантов решений с тем, чтобы впоследствии выбрать наилучший, учитывая технологию, оборудование, материалы. Однако организация современного процесса проектирования такова, что нужно, как правило, выпускать заказную документацию до начала проектной проработки. В этих условиях получение оптимальных проектных решений становится бессмысленным, так как в дальнейшем все сводится к попыткам как-то обновить выбор уже заказанных аппаратов, машин, трубопроводов.

Затраты на проектирование составляют несколько процентов от общей стоимости строительства производства. Эти несколько процентов в настоящее время не позволяют создать оптимальный проект. Поэтому экономия в затратах на проектирование оборачивается серьезными издержками при строительстве и эксплуатации производства.

Получается, что проектирование отстает от темпов развития науки. Но чем в меньшей степени используются научные достижения при проектировании, тем больше разрыв между наукой и практикой проектирования, что в итоге сказывается на развитии не только экономики страны, но и науки. Исследования действий как отдельных специалистов, так и коллективов проектировщиков в процессе создания проекта показали, что 30—40% времени тратится на согласование отдельных частей проекта, около 50—60% — на выполнение эскизов, чертежей, расчетов, составление проектной документации и только 10—20% используется на творческое осмысление задачи [1]. Кроме того, решения принимаются без вариантной проработки, а в основе расчетов и согласований обычно лежат укрупненные показатели, на основании которых и выполняется корректировка решений по совокупности показателей. При такой практике проектирования вряд ли следует ожидать получения оптимального с технологической и экономической точек зрения проекта.

Одним из радикальных способов решения проблем, стоящих перед проектными организациями, является автоматизация процесса проектирования. В связи с этим неизмеримо возрастает роль модельных методов проектирования, основанных на математическом моделировании и макетировании с отработкой отдельных явлений (процессов) на физических моделях. В этих условиях большое значение приобретает тщательный анализ опыта разработки и внедрения отдельных программ, технологических линий и САПР на уровне проектного института.

Анализ работ по автоматизации проектирования в химической промышленности показал, что можно выделить три основных этапа автоматизации, качественно отличающихся друг от друга [1]: а) автоматизация отдельных рутинных работ и небольших инженерных расчетов при отсутствии автоматизации процесса принятия решений; б) автоматизация сложных задач и комплексов задач, массовое решение оптимизационных задач, хранение огромных массивов информации в памяти ЭВМ и соответственно информационное обеспечение традиционного проектирования, создание библиотек программ различной направленности; в) создание САПР, которые на основе соответствующего математического обеспечения позволяют автоматически принимать решения по многим вопросам стратегии проектирования и выбора адекватных методов решения из имеющихся библиотек.

На современном этапе на базе высокопроизводительных средств вычислительной техники интенсивно развивается теория и практика создания САПР — комплекса специальным образом организованных элементов, предназначенных для преобразования абстрактных представлений об объекте в форму документа (проекта) и управления им в условиях ограниченности ресурсов.

2.1. Декомпозиция задачи проектирования

По своей сути проектирование представляет собой многоуровневый итерационный процесс последовательной детализации и оптимизации проектных решений. Схематично это можно представить как последовательное выполнение стадий синтеза вариантов проектных решений; оценки и выбора допустимых (физически реализуемых) решений; выбора наиболее рационального варианта проектного решения; принятия окончательного варианта проекта.

Опыт показывает, что традиционная практика проектирования даже при использовании типового проекта или макетов не позволяет «просмотреть» в указанной схеме более одного-двух вариантов, в то время как их количество при проектировании современного химического производства практически бесконечно. Поэтому выбор оптимального варианта проекта даже в упрощенной постановке задачи не может быть выполнен в приемлемые сроки вследствие вычислительных трудностей и высокой размерности.

В связи с этим традиционно проектировщик интуитивно применяет метод функциональной декомпозиции, представляя общую задачу в виде последовательности более простых подзадач, либо имеющих решение, либо не представляющих затруднений. Сама структура проекта (наличие частей), а также проектного института (наличие подразделений) является следствием применения декомпозиционного подхода к решению задачи проектирования.

При проектировании химического производства исходная задача последовательно делится на некоторое число функциональных подсистем до уровня элементов или аппаратов. Например, при выполнении стадии технологического проектирования все производство сначала делится на отделения (подготовки сырья, химическое превращение, выделение продуктов), затем на совокупности однотипных аппаратов (реактора, ректификационных колонн, теплообменных систем и т. д.). Полученная в результате декомпозиции система представляет собой ориентированный граф, каждой вершине которого сопоставлен аппарат (группа аппаратов), а дуги характеризуют информационные потоки. Следовательно, этим графом можно отобразить задание в проект, т. е. собственно проектирование. Эту иерархическую структуру можно интерпретировать как сетевой график проектирования (изготовления проекта).

Таким образом, полная декомпозиция сложной системы (процесса проектирования) является многошаговой. Опыт показывает, что чем больше разнородных параметров и уровней имеет система, тем большее число шагов имеет декомпозиция до получения разрешимого сетевого графика. Может оказаться, что на некоторых уровнях графа возможно дополнительное ветвление в зависимости от исходных данных, т. е. данных более высокого уровня.

В результате появляются альтернативные варианты, вносящие неоднозначность графа как сетевого графика. Устранение альтернативности обычно достигается внесением дополнительной информации на данном уровне декомпозиции.

Следует заметить, что ориентированный граф дает лишь потенциальную возможность реализации отображения, поскольку зависит от сложности систем, с которыми ассоциированы вершины. Хотя по условию декомпозиции задачи варианты проще, чем исходная, все же они могут оказаться весьма громоздкими для непосредственной реализации. Поэтому возникает вопрос о выборе таких наборов подзадач, которые бы определяли простые элементарные отображения с тривиальными решениями, т. е. о выборе базисных подзадач. Такого рода подзадачи накапливаются на основе практики проектирования, анализа типовых решений на отдельных уровнях иерархии создания проекта.

Набор базисных подзадач (функций), обычно реализуемых одним или несколькими алгоритмами, является наиболее содержательной частью систем проектирования и отражает уровень автоматизации процесса проектирования, а также в значительной степени определяет качество выпускаемых проектов. По существу, это математические модели, используемые на отдельных стадиях проектирования.

Построение иерархической структуры (графа) разработки проекта, глубина декомпозиции зависят от степени математической проработки этапов проектирования. При наличии пакетов прикладных программ, реализующих функции частей проекта, проектирование будет вестись практически в автоматическом режиме и декомпозиция исходной задачи может выполняться до этого уровня. Однако это не означает, что функции частей проекта однозначные и неизменные. Сами по себе части проекта также функционально организованы и ориентированы на выполнение альтернативного набора функций в зависимости от исходных данных. Можно сказать, что их функции достаточно отработаны, чтобы относиться к ним как к чему-то законченному. Рассмотренная ситуация соответствует автоматизации проектирования на самом верхнем уровне декомпозиции задачи. Ясно, что при разработке математического обеспечения частей также используется стратегия декомпозиции.

Математические решения задачи разработки проекта методом декомпозиции формулируются как определение оптимального значения некоторой целевой функции φ для всех возможных вариантов топологии P_j , $P_j \subset R$ (каждый из которых характеризуется набором переменных и параметров), путем разделения общей задачи P на ряд подзадач и выделения множества переменных декомпозиций T , определяющих условия объединения решений подзадач, таким образом, чтобы выполнялись следующие условия:

$$P = \bigcup P^i; Z^i = P^i \cup T; P^1 \cap P^2 \cap \dots \cap P^v \neq \emptyset. \quad (2.1)$$

Тогда выбор оптимального варианта декомпозиции исходной задачи проектирования на совокупность подзадач P^i должен осуществляться таким образом, чтобы значение φ было оптимальным:

$$\begin{aligned} \varphi^*(P) &= \text{opt}_{P^i \subset P} \left(\sum_j \varphi(P^j) \right) = \\ &= \text{opt}_{P^i \subset P, T} \left(\sum_j \varphi(P^j \cup T) \right) = \text{opt}_{P^i \subset P} \left\{ \text{opt}_T \left[\sum_j \varphi_j^*(P^j \cup T) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

где $\varphi_j^*(P^j \cup T)$ — оптимальные значения критериев эффективности подзадач. Из (2.2) следует, что решение задачи декомпозиции представляет собой типичную задачу двухуровневой оптимизации, когда сначала находится оптимум частных решений (подзадач), а затем и общей по параметрам декомпозиции.

2.2. Функциональная структура системы автоматизированного проектирования

Ранее было показано, что традиционное проектирование химических производств даже с использованием ЭВМ — весьма сложный и трудоемкий процесс, выполняемый различными специализированными коллективами проектировщиков. При этом один коллектив, например, занимается подбором катализаторов и определением параметров реакторов, другой — разрабатывает методы разделения продуктов химического превращения, третий — подбором материалов, оборудования и т. д. с широким привлечением аналогий и типовых решений. Выполненные исследования по отдельным узлам объединяются в технологические схемы и апробируются на лабораторных и пилотных установках. Результаты экспериментальных исследований в порядке обратной связи поступают к проектировщикам и являются основой для внесения изменений и усовершенствований на любой стадии обработки проекта.

На современном этапе развития метода математического моделирования прикладное математическое обеспечение, используемое на каждой из стадий и по каждому из процессов, достаточно развито и позволяет решать весь комплекс задач на высоком научно-техническом уровне. Используемые пакеты программ на основе исходных данных осуществляют весь комплекс расчетов и в качестве выходной информации способны давать значения технологических и конструкционных параметров, экономические оценки и т. д., т. е. данные, не только определяющие отдельные стадии проектирования, но и характеристики их взаимосвязи.

Совершенствование прикладного математического обеспечения, средств вычислительной техники и информационной базы позволяет перейти от тиражирования химических производств на

основе опыта эксплуатации и интуиции проектировщика к созданию новой идеологии проектирования — автоматизированного проектирования. В современной постановке проблема автоматизированного проектирования представляется как целенаправленный поиск оптимального варианта проекта на основе максимального использования достижений науки и техники.

Для создания САПР недостаточно наличия пакетов прикладных программ для решения как отдельных задач, так и расчета совокупности аппаратов. Необходима новая методология проектирования. Несмотря на имеющийся опыт разработки систем, методология автоматизированного проектирования как наука еще не сформировалась. Автоматизация проектирования, по крайней мере в практических приложениях, находится на уровне искусства, большинство решений принимается на основании интуиции, а сравнительная оценка различных методов затрудняется из-за отсутствия достаточного статистического материала.

Что в принципе отличает автоматизированное проектирование от обычного использования ЭВМ для выполнения проектных расчетов, так это то, что автоматизированное проектирование ориентировано на использование систем, а не разобщенных наборов программ.

Основная концепция автоматизированного проектирования состоит в том, чтобы рассматривать САПР как системный инструмент для использования во многих областях и относиться к опыту, программам, вычислительной технике как к методам.

Автоматизированное проектирование и разработка систем (создание САПР) находится в сфере интересов института системных исследований. Первоначально было принято решение не давать формального определения САПР (для расширения свободы действий на ранней стадии исследований в этой области). В связи с этим развивается несколько подходов к разработке САПР.

Подходы, в которых САПР рассматривается как методологическая наука, в основном мотивировались практическими потребностями активизации промышленного проектирования. Это нашло выражение в рассмотрении САПР как комплекса вычислительных средств (программного обеспечения и техники), на основе которых стали формироваться системы для решения проектных задач и комплексы системных методов для их стыковки. Одним из определений САПР, которое может быть выведено на основе такого подхода, является следующее: САПР — есть объединение соответствующей вычислительной техники и модулей программного обеспечения с целью решения проектных задач в конкретной области приложения.

В соответствии с этим определением САПР есть программно-машинный комплекс, состоящий из технических средств, системного и прикладного математического обеспечения и средств ведения диалога.

Другой более академический подход к определению автоматизированного проектирования состоит в рассмотрении всех аспектов проектирования, включая социальную, экономическую и техническую деятельность, и в применении фундаментальных основ системного анализа для локализации и определения роли этой деятельности в общем комплексе промышленно развитого общества. Первоочередное внимание при таком подходе уделяется процессам принятия решений, ведущих к выбору частных объектов проектирования, определению факторов, влияющих на принятие этих решений, и выявлению законов, определяющих влияние этих факторов друг на друга. В соответствии с этим подходом САПР можно определить следующим образом: САПР — есть средство оптимизации принятия решений путем обобщения созидательной активности и создания некоторой синтетической теории проектирования, положения которой могут быть воплощены в конкретных программах.

Что характерно для этих определений, так это внешне второстепенная роль технических средств, хотя вычислительная техника является базой, усилителем и ускорителем интеллектуальных возможностей человека. В этом смысле интересно определение суперЭВМ: «СуперЭВМ — это ЭВМ, которая отстает только на одно поколение от задач, над проблемами решения которых работают в настоящее время ученые» [2]. Тем самым подчеркивается важность программного обеспечения, раскрывающего предметную область и определяющего стратегию принятия решений.

Приведенные определения САПР, по существу, характеризуют целевое их назначение. Первое относится к конкретной области приложения. Так, в соответствии с общепромышленными руководящими методическими материалами по созданию САПР [3], последняя определяется как «организационно-техническая система, состоящая из комплекса средств автоматизации проектирования, взаимосвязанного с подразделениями проектной организации, и выполняющая автоматизированное проектирование». При этом под комплексом средств автоматизации понимается совокупность средств методического, программного, технического, информационного и организационного обеспечения. Что касается второго определения САПР, то оно в большей степени ориентирует на развитие систем, способных решать проблемы на уровне искусственного интеллекта.

Исходя из традиционной практики проектирования (см. гл. 1), можно выделить четыре этапа, выполняемых с использованием ЭВМ в той или иной степени. Эти этапы отражают не только сложность решения задачи разработки проекта, но и его итерационный характер. Естественно, при конкретной реализации САПР функции этапов могут перераспределяться или объединяться в зависимости от исходной концепции разработки системы.

К о н ц е п т у а л ь н о е п р о е к т и р о в а н и е — связано

с определением потребности в продукции на основании рыночных данных, промышленности, планового развития отрасли и т. д. и включает процессы разработки и принятия решений, ведущих к описанию проекта в общих чертах. На этом этапе основное внимание уделяется анализу ранее известной аналогичной или конкурирующей продукции, анализу патентов, стандартов, оценке источников сырья, рынков сбыта. Для этого должны быть средства для проведения предварительных вычислений с целью проверки осуществимости идеи, получения предварительных экономических оценок и т. д. Этот этап является самым ответственным, поскольку основывается на современном уровне развития технологии, состоянии научных разработок, прогнозирующей силе проектировщиков. Для получения реалистических оценок САПР должна обладать интеллектуальными свойствами, адекватно отображать предметную область. Функции этапа, по существу, состоят в разработке задания на проектирование.

Проектный анализ — связан с явным (физическим) или модельным анализом предложенной схемы получения продукции. Здесь требуется точное определение топологии объекта, параметров сырья и выходной продукции, источников энергии и т. д. Чаще всего физическая реализуемость идеи проверяется на основании аналогов производства или экспериментальных лабораторных исследований. Эти данные являются базовыми для формирования технологической (принципиальной) схемы производства. Однако многовариантность ее реализаций не позволяет априори сделать оптимальный выбор без использования ЭВМ. Дороговизна и сложность экспериментального обследования диктуют настоятельную необходимость выбора технологической схемы методом математического моделирования. На этом этапе во многих случаях эффективным является наличие возможности непосредственного изменения схемы в интерактивном режиме, так как исключается анализ заведомо нереализуемых вариантов. Этот этап можно интерпретировать как предварительную разработку проекта.

Детальное проектирование — состоит в проектировании всех аппаратов и установок, необходимых для производства продукции. Определяются конструкционные характеристики оборудования, взаимосвязи между отдельными стадиями производства, оцениваются возможности вторичного использования энергетических потоков, т. е. формируется окончательный вариант технологической схемы, удовлетворяющий требованиям замкнутости энергетических и материальных потоков. Два последних этапа проектирования тесно взаимосвязаны и часто выполняются как один, особенно при ограниченном количестве вариантов технологических схем. Дело в том, что проектный анализ в силу многовариантности задачи обычно выполняется

по упрощенным математическим моделям единиц оборудования и, таким образом, имеет основной целью расчет материальных и энергетических потоков схемы. Однако в этом случае имеется вероятность потери оптимального варианта вследствие приближенного характера используемых моделей, т. е. неучета «тонкостей» процесса. Диалоговый или интерактивный режим выполнения проектного анализа позволяет на основе опыта специалиста-технолога сделать выбор в пользу того или иного варианта, однако не гарантирует получение именно оптимального. Поэтому целесообразнее выполнять этот этап по точным моделям отдельных процессов, предварительно сократив область поиска на основании, например, анализа физико-химических и других свойств сырья, эвристических правил, промежуточных результатов, экономических оценок и т. д.

Подготовка проектной документации — состоит в увязке разработок предыдущих стадий в виде выходной документации. В интегрированных системах проектирования этот этап включает создание систем управления производством, обработку коммерческой информации, оценку перспектив производства.

Выделенные этапы проектирования, очевидно, не являются строго последовательными в процессе разработки проекта. От каждого из них может потребоваться возврат на предыдущие этапы для уточнения или изменения данных или частных решений. Только документация является фактическим итогом выполнения всех этапов.

Точность решения задач на каждом из выделенных этапов определяется совершенством математического обеспечения. Большинство моделей отдельных процессов в настоящее время разработано в проверочном варианте и предполагает широкое использование экспериментальных данных для уточнения отдельных параметров. Таким образом, проектирование, в соответствии с выделенными этапами, можно рассматривать как многократное моделирование при различных наборах входных параметров, изменении топологии производства и режимных параметров отдельных моделей для поиска их оптимального сочетания. Отсутствие экспериментальных данных для уточнения параметров отдельных моделей лишь увеличивает затраты машинного времени, поскольку расчет будет производиться при изменении корректирующих параметров модели в некотором диапазоне.

Рассмотренная технология проектирования по количеству этапов отличается от традиционной, однако охватывает весь круг вопросов, которые необходимо решать. Вообще, даже и при сохранении этапности разработка проекта с помощью САПР отличается содержанием и объемами выполняемых операций.

Очевидно, разрабатываемая САПР должна соответствовать определенным требованиям, характеризующим ее место в сфере

деятельности проектировщика. Эти требования возникают на основе ряда вопросов, на которые должен ответить разработчик, приступая к созданию САПР, а именно [4]: как САПР будет связана с другими промышленными процессами, такими, как производство, учет, традиционное проектирование; каким образом влияют экономические оценки на процесс создания САПР, например: как можно быстро и в максимальной степени окультурить затраты на создание САПР; какие подсистемы, в виде автономных или зависимых, необходимо выделить; каким образом пользователь будет общаться с системой: какого рода необходим язык взаимодействия; каким образом писать прикладные программы, в частности, на каком языке программирования; какое системное математическое обеспечение необходимо при написании программ при создании САПР; какая необходима вычислительная техника, включая периферию; как скоро система может быть введена в эксплуатацию, как и каким образом возможно ее расширение; в чем будет состоять процесс обучения пользователя, как долго он может продолжаться; какая сопроводительная документация к системе необходима; каков необходимый обслуживающий персонал для поддержания и ведения системы.

На отдельные вопросы достаточно просто ответить, однако в совокупности ответ затруднителен даже для опытного системного программиста. В идеале разработчик должен быть специалистом как в области вычислительной техники, так и в области конкретного приложения системы.

Следует заметить, что при использовании САПР изменяется содержание работы проектировщика. Действия проектировщика заключаются в принятии решений, однако при использовании САПР решения на нижнем уровне принимаются алгоритмами, находящимися в памяти ЭВМ. Если ранее проектировщик принимал решения на всех уровнях подготовки проекта, то использование САПР освобождает его от обдумывания результатов промежуточных решений. Он как бы теряет специализацию.

Изменяется и статус работы проектировщика. В процессе ввода в эксплуатацию САПР проектировщик, который использует ее, постепенно приобретает более высокий статус по сравнению с тем, кто выполняет работу без ЭВМ. Однако это временный, локальный и относительный эффект. Более тонкий эффект состоит в том, что если при традиционном проектировании решение с высшего уровня передается на нижний в виде обязательных установок, то при использовании САПР такая иерархия нарушается. Алгоритмы принимают решения на нижнем уровне и являются установками для специалистов более высокого уровня. При возникновении такого несоответствия статусов проектировщиков возможно отвержение вычислительной техники безотносительно к ее возможностям.

Разработка САПР по глубине проработки и разнообразию решаемых задач является комплексной проблемой, связанной с целевым объединением достижений в области химической технологии, формализации математических описаний процессов, вычислительной техники, вычислительной математики, логического и лингвистического анализа. При ориентации на широкого пользователя каждый из этих вопросов должен быть проработан до алгоритма; совершенство системы в конечном счете определяет частоту ее использования и широту круга пользователей.

Целью создания САПР является концентрация прикладного математического обеспечения в форме, позволяющей активное ее применение при решении практических задач. А это значит, что система должна содержать совершенные алгоритмы и доступные широкому пользователю средства обеспечения диалога. Она должна на любом этапе разработки находить пользователя, чей опыт эксплуатации поможет конкретнее определить направления дальнейшего совершенствования и развития.

И еще на одной стороне проблемы хотелось бы остановиться. Модели и алгоритмы, объединяемые в систему, должны быть совместимы по языкам программирования, иметь унифицированную форму представления входной и выходной информации для облегчения обмена информацией, совместимы по единицам измерения, точности, быть составленными на единой методологической основе. Опыт работы на ЭВМ показывает, что даже алгоритмы, собранные в фондах, имеют весьма разнородные характеристики, часто несовместимые между собой. Это обстоятельство делает необходимым наряду с разработкой структуры системы уделить значительное внимание (и, пожалуй, основное) вопросам разработки алгоритмов расчета отдельных процессов.

Итак, создание САПР должно проводиться на основе комплексного рассмотрения проблемы проектирования путем решения, по крайней мере, трех взаимосвязанных задач: а) исходя из принципов системного анализа, разработать иерархическую структуру проектируемого производства (группы производств), отражающую адекватно свойства последнего и вскрывающую причинно-следственные отношения между отдельными явлениями и стадиями (по существу, декомпозиция проблемы); б) на единой методологической основе разработать и систематизировать математические модели отдельных элементов технологической схемы, математическое обеспечение диалогового взаимодействия; в) разработать принципы построения и структуру САПР, отвечающей современному уровню развития вычислительной техники и прикладного математического обеспечения.

Концепции разработки САПР. На структуру и методологию построения САПР большое влияние оказывает принимаемый подход к ее разработке и внедрению [5]. Возможны следующие три подхода: система разрабатывается в целом во всех ее деталях,

внедрением осуществляется по завершению ее частей; поэтапная детальная проработка элементов САПР, внедрение в виде отдельных подсистем; разработка структуры всей системы с последующей постепенной детализацией подсистем и частей, сопровождающейся внедрением промежуточных разработок.

Первый подход ориентирован на решение четко определенного круга задач. В этом случае система имеет фиксированный состав, определенную логику проектирования и связи подсистем, что позволяет в окончательном виде сформулировать ее иерархическую структуру. Система разрабатывается как единое целое и, как следствие, с более тщательной обработкой элементов, что гарантирует высокие ее показатели. Но такой подход требует огромных коллективов, средств и времени. Кроме того, используемая логика проектирования противоречит основному смысловому назначению системы (универсальности, возможности реализации различной логики проектирования, постоянному развитию). Концепция целостности разработки системы вполне приемлема при создании отдельных элементов или ориентированных пакетов программ, но вряд ли приложима к решению задач разработки проекта сложного производства.

Второй подход связан с поэтапной разработкой и внедрением отдельных элементов и подсистем. В этом случае речь идет, по существу, об автоматизации отдельных частей проекта в некотором смысле независимо, что затрудняет стыковку отдельных частей (подсистем) в единую систему, так как каждая разрабатываемая часть имеет свою специфику, структуру, не связанную с общими задачами всей системы. Кроме того, процесс разработки частей системы может быть рассредоточен во времени и не согласован по техническим и программным средствам. Типичными примерами неудовлетворительности такого подхода являются попытки создания отдельных систем из разрозненных, в различных условиях составленных отдельных программ и комплексов программ. В этом случае требуется коренная перестройка в связи с изменившимися требованиями к их построению, оформлению и включению в систему.

Третий подход заключается в том, что определяется укрупненная конфигурация всей системы с классификацией функций отдельных частей, формируются общие принципы построения подсистем и их взаимодействия. Затем идет поэтапная совместная разработка частей (не обязательно всех сразу), нарастающая мощность системы и возможности для решения различных задач проектирования. Внедрение результатов производится непрерывно по мере разработки. В этом случае процесс создания системы не имеет «конца», можно говорить о различных очередях системы, каждая из которых по мере внедрения обладает все возрастающими возможностями. Такой подход признан наиболее целесообразным при разработке САПР и стал возможным благодаря уни-

фикации приемов программирования, вычислительной техники, формулированию принципов.

Основные принципы создания САПР. Как уже отмечалось, переход к автоматизированному проектированию не исключает существующей в традиционном проектировании декомпозиции задач и объекта по функциональному назначению, разве что могут выделяться более обобщенные подразделения. Как и ранее, необходимо рассчитывать материальный и тепловой балансы химико-технологической системы (ХТС), характеристики оборудования, решать задачи компоновки оборудования и т. д. Можно предполагать, что внедрение САПР позволит объединить решение этих задач без выдачи и оформления промежуточных документов, что сократит время проектирования. В связи с этим в САПР выделяются отдельные подсистемы по признаку решаемых задач (функциональные подсистемы) в рамках двух этапов — технологического и общепромышленного проектирования.

В подсистеме работает не одна, а несколько десятков или даже сотен программ, и она постоянно модифицируется, развиваясь вглубь и вширь, расширяя свои функциональные возможности и класс решаемых задач. Поэтому система должна проектироваться так, чтобы вносимые изменения и дополнения не нарушали общей работоспособности и требовали минимальных затрат на ее поддержание. Другими словами, подсистема, развиваясь, должна оставаться достаточно консервативной по отношению к САПР. По-видимому, следует считать, что работа над созданием подсистем и системы в целом — это многолетняя и постоянная форма деятельности проектной организации, и главное состоит в том, чтобы на начальном этапе работ выбрать концепцию разработки, позволяющую сохранить преемственность развития и совершенствования системы.

Работы по созданию САПР имеют ярко выраженную отраслевую специфику. Методы проектирования, многолетний опыт, нормативы, стандарты, общая организация работ — все это складывалось исторически, и поэтому лучшие отраслевые традиции в проектно-конструкторских работах должны быть сохранены и развиты при создании САПР. Основываясь на этом опыте и нормативных положениях, а также на опыте применения ЭВМ, развитие САПР регламентируют специальными ГОСТами, общепромышленными материалами, материалами проектных НИИ, которые имеют целью упорядочить дальнейшее их развитие. Так, при создании и развитии САПР рекомендуется применять следующие общесистемные принципы [3].

П р и н ц и п в к л ю ч е н и я, предусматривающий включение разрабатываемых в рамках проектных институтов подсистем в САПР без изменения их структуры и функций за счет специальных адаптирующих программ.

П р и н ц и п с и с т е м н о г о е д и н с т в а, предусматри-

вающий единство языка программирования, операционной системы и их расширителей на всех стадиях создания, функционирования и развития САПР.

Принцип развития, предусматривающий развитие САПР за счет вводимых в нее подсистем, организации связей между ними, интеграции баз данных с последующим переходом к имитационной системе, способной генерировать системы более низкого уровня.

Принцип комплектности, предусматривающий обеспечение связности проектирования отдельных элементов и всего объекта в целом на всех стадиях проектирования за счет предусмотренных компонентов САПР, осуществляющих комплексное согласование и контроль характеристик элементов и объекта в целом.

Принцип информационного единства, предусматривающий использование терминов, символов, условных обозначений, проблемно-ориентированных языков программирования и способа представления информации в подсистемах, средствах обеспечения и компонентах САПР, установленных в отраслях соответствующими нормативными документами.

Принцип совместимости, предусматривающий совместимость подсистем по символам, обозначениям, кодам, информационным и техническим характеристикам структур связей между подсистемами, средствами обеспечения и компонентами САПР на таком уровне, чтобы обеспечивалось совместное функционирование всех подсистем и сохранилась открытая структура системы в целом.

Принцип инвариантности, предусматривающий универсальность подсистем, т. е. инвариантность к проектируемым объектам и отраслевой специфике, возможность работы как в системе, так и в автономном режиме.

Перечисленные принципы создания САПР не охватывают всего многообразия условий и требований системного проектирования различных обеспечений, но они дают твердые установки в ключевых вопросах разработки и реализации САПР.

Структура и состав САПР. Анализ работы проектных организаций химической, нефтехимической и нефтеперерабатывающей промышленности позволяет сделать ряд выводов относительно характерных особенностей и общности в номенклатуре выполняемых этапов проектирования.

Во-первых, производства с непрерывной технологией химической и смежных отраслей промышленности имеют целый ряд общих или аналогичных подразделений, что находит выражение и в идентичности соответствующих частей проекта и отделов проектных институтов (технологических, архитектурно-строительных, электротехнических и т. д.). Имеющиеся различия носят скорее частный характер, нежели определяющий, настолько,

что необходима параллельная разработка соответствующего методического и программного обеспечения в проектных институтах смежных отраслей промышленности. Системные принципы создания САПР (в частности, инвариантность подсистем) регламентируют инвариантность к проектируемым объектам и отраслевой специфике. Тем не менее в тенденциях автоматизации проектирования преобладает отраслевая ориентация.

Во-вторых, комплексная переработка сырья приводит к созданию производств с энерготехнологическими циклами и совмещенными технологиями, относящимися к различным отраслям промышленности. Задача разработки проекта такого производства обычно выходит за рамки отраслевой САПР.

В-третьих, ряд различных по функциональному назначению подразделений проектного института выполняют структурно подобные задачи проектирования, в основе которых используются одинаковые методы вычислительной математики (например, трассировка трубопроводов или синтез технологической схемы разделения методом ветвей и границ).

Все это свидетельствует о целесообразности концентрирования усилий по разработке САПР на базе общесистемных принципов и межотраслевого уровня. Модульная структура подсистем позволяет создавать программные комплексы широкого профиля и адаптировать последние к конкретным условиям генерации соответствующей версии. Хорошим примером таких систем является операционная система (ОС), когда системное обеспечение генерируется под конфигурацию ЭВМ и класс решаемых задач.

В наметившейся тенденции создания САПР выделяются несколько уровней иерархии соподчинения, начиная от отраслевого [1, 6]. САПР отраслевой ориентации (например, САПР химической промышленности) является устойчивой категорией со своим научным потенциалом, ведомственными стандартами и нормативами, собственной номенклатурой объектов проектирования. Она связана с системами более низкого уровня (подотрасль, проектный институт и т. д.) и снабжает их математическим, информационным, методологическим обеспечением общесистемного назначения. Самым нижним уровнем можно считать автоматизированные рабочие места проектировщика, имеющие профессиональную ориентацию (по используемому математическому обеспечению), т. е. выделенные на решение отдельных задач процесса проектирования.

САПР различных уровней связаны между собой, во-первых, информационными потоками и, во-вторых, программными средствами. При такой иерархии систем различных уровней возможна реализация идеи генерации версий САПР для уровней проектной организации, подотрасли, группы однотипных объектов и т. д. Это позволит сохранить единство концепций и принципов на всех уровнях проектирования, а также обеспечит совместимость программного обеспечения. Состав, функции и выходная информа-

ция систем будет определяться спецификой работ проектного института (отдела) и принятым уровнем автоматизации проектных работ. Практическая реализация рассмотренной концепции создания САПР осуществляется специально созданными центрами САПР при ведущих проектных институтах соответствующих министерств (ведомств).

Анализ функций и содержания частей проекта позволяет выделить несколько групп проектных работ, обладающих общими признаками или сходным характером операций, а именно: технологическое, общинженерное, строительное и санитарно-технико-экономическое проектирование (рис. 2.1). Естественно, такое деление условно. В зависимости от специфики проектируемого объекта возможно перераспределение частей между группами или их объединение. Но оно удобно с целью разграничения проектных работ по тематике действий и в некотором смысле определяет структуру проектного подразделения.

В качестве основных структурных признаков создания САПР целесообразно принять декомпозицию процесса проектирования на два этапа — технологический и общинженерный.

Для первого этапа характерно создание индивидуальных подсистем, ориентированных на автоматизацию проектирования конкретных технологических производств (синтеза аммиака, производства серной кислоты, первичной переработки нефти и т. д.). Соответственно для каждого приложения формируется специфический набор базисных подсистем (функций).

Для второго этапа создаются общинженерные подсистемы, являющиеся практически типовыми для любого вида технологических производств (водоснабжение и канализация, санитарно-технические задачи, электрообеспечение и т. п.). Подсистемы такого рода могут разрабатываться ведущими организациями соответствующего профиля проектных работ с соответствующей адаптацией их по отраслевым признакам.

Подсистемы и компоненты (см. рис. 2.1) интегрированы на уровне общих технических средств, общего методологического, программного и организационного обеспечений. Каждая из подсистем, в свою очередь, состоит из нескольких частей. Например, подсистема «Физикохимия», основной функцией которой является выдача требуемых характеристик (свойств, параметров) веществ и их смесей, должна содержать базы данных по свойствам, оборудованию, комплексы программ для расчета и прогнозирования свойств и т. д. Подсистема «Генплан», основная функция которой — анализ вариантов генерального плана химического производства, состоит из алгоритмов выбора площадки строительства, разработки объемно-планировочных решений и конструирования инженерных и транспортных коммуникаций. Аналогично и для других подсистем установлены строго определенные функции.

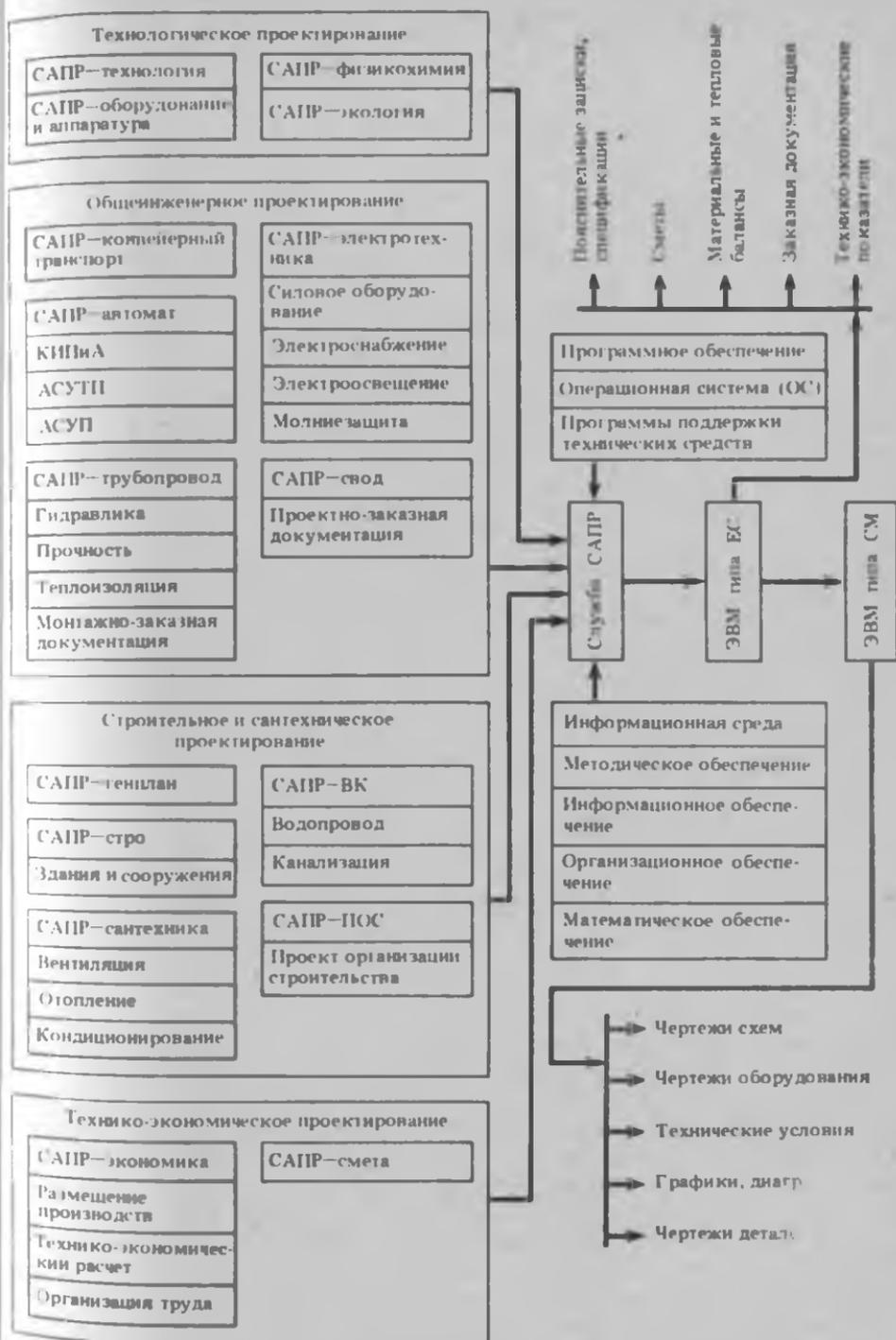


Рис. 2.1. Функциональная структура системы проектирования химического производства

2.3. Технологическое проектирование

В основе любого химического (нефтехимического и т. п.) производства лежит определенная технология, которая сочетает в себе достижения научно-технического прогресса в производственной и социальной областях деятельности человека. Создание производств на уровне мировых образцов требует гармоничного развития всех отраслей промышленности, связанных с реализацией технологии, их технической подготовленности. Только в этих условиях возможна эффективная реализация идеи.

Целью технологического проектирования является синтез оптимальной технологической схемы, расчет материально-тепловых балансов объекта, выбор типов и расчет параметров аппаратов и машин, разработка систем управления производством. Этот этап обычно (при создании новых производств) ведется на основании данных, полученных от головного НИИ, отвечающего за качество технологических решений, соответствие их мировым стандартам.

Основу технологического проектирования в САПР составляют математические модели (модули), которые позволяют не только создавать систему, но и повышают эффективность труда проектировщиков. Модульный принцип построения математических моделей (подсистем) позволяет использовать типовые решения на отдельных этапах проектирования, строить разветвленные и гибкие вычислительные схемы. Однако, несмотря на очевидные преимущества, применение типовых модулей многократного использования может сдерживать творческую инициативу в плане разработки оригинальных проектов. Поэтому необходимо иметь оптимальное сочетание между типовым и оригинальным проектированием, что наиболее удобно реализуется в диалоговом режиме работы проектировщика с ЭВМ.

Этап технологического проектирования является, пожалуй, наиболее динамичным в САПР, поскольку математические модели отдельных процессов, методы анализа и синтеза технологических схем постоянно совершенствуются по мере развития теоретических основ химической технологии, методов вычислительной математики. Эта динамичность и позволяет оперативно вносить изменения в разрабатываемые проекты и действующие производства на этапе реконструкции.

Многомерность и сложность задач проектирования не позволяют получить аналитическое решение для однозначного выбора наилучшего варианта реализации технологической схемы. И эту задачу приходится решать как задачу многокритериальной оптимизации численными методами путем анализа многих возможных вариантов. На этапе технологического проектирования решается именно эта задача, и эффективность ее решения зависит

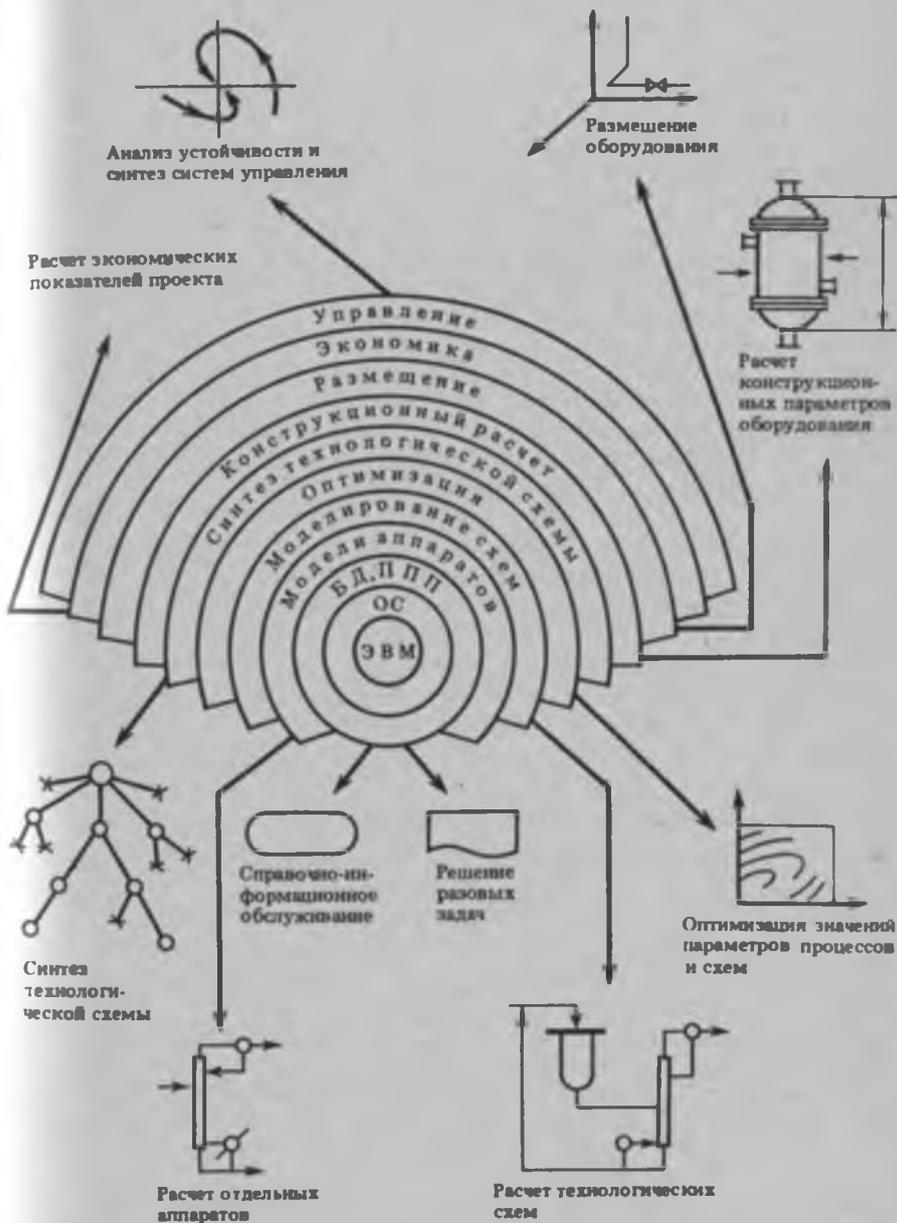


Рис. 2.2. Структура САПР технологического проектирования

от точности математических моделей, характеристик вычислительных средств.

Примерная структура САПР технологического проектирования приведена на рис. 2.2. Ее основу составляют: банк данных (БД) — информационное обеспечение, содержащее данные о свойствах перерабатываемых и получаемых веществ, параметрах оборудования и схем, экономические и технико-экономические показатели последних, информационно-справочные данные и т. д.; пакеты прикладных программ (ППП) общего и специализированного назначения (алгоритмы решения задач оптимизации, модели аппаратов и технологических схем); алгоритмы синтеза технологических схем; алгоритмы конструкционного расчета и выбора оборудования, размещения оборудования; алгоритмы синтеза систем управления. Организационно САПР технологического проектирования состоит из ряда взаимосвязанных подсистем, принципы разработки, структура и состав которой подробно изложены во второй части книги.

Благодаря динамичности системы математическое обеспечение и содержание баз данных постоянно обновляется по мере появления новых технологических решений, новых веществ. Оперативное ведение баз данных как наиболее важной и ответственной части системы проектирования за качество разработки необходимо осуществлять на основе автоматизированного эксперимента в рамках АСНИ. Вопросы автоматизации сбора и обработки экспериментальных данных рассматриваются в следующей главе.

2.4. Общепромышленное проектирование

Задачи этого этапа отличаются большим разнообразием по затратам, степени использования творческого труда. В процессе проектирования современного производства доля рутинного труда достигает 40%. Поэтому при решении задач этого этапа речь идет не только об автоматизации, но и механизации проектных работ. Конечным результатом процесса проектирования является комплект документов, чертежей, смет и спецификаций. При традиционном изготовлении этих материалов затрачивается труд большого коллектива проектировщиков. Первые разработки САПР были ориентированы именно на механизацию этой части разработки проекта, особенно на составление спецификаций и комплектование оборудования. С внедрением графических устройств все в большей степени функции изготовления чертежной документации передаются ЭВМ.

Следует отметить, что существующая практика разработки проектной документации в основном ориентирована на неавтоматизированные способы проектирования и нуждается в существенной перестройке. Основными недостатками изготовления про-

ектных и нормативных документов являются: а) отсутствие единой стратегии и эффективных методов разработки на отдельных этапах, а также контроля результатов на отсутствие ошибок; сводные документы практически составляются по завершению разработки и контролируются только с точки зрения оформления; б) отсутствие единой формы представления данных об объекте разработки, что затрудняет взаимопонимание участников работ (заказчика, разработчика, строителя) и установление юридически оправданных правил их взаимодействия; в) устранение ошибок осуществляется на самом последнем этапе работы, зачастую в неблагоприятных условиях (на объекте). Между тем специальными исследованиями установлено, что основная доля ошибок при создании крупных промышленных комплексов приходится на этап разработки задания на проектирование и этап проекта, причем устранение их обходится тем дороже, чем позднее они обнаружены; г) существующие схемы обеспечения строек документацией и комплектация их оборудованием и материалами приводят к задержке внесения изменений по обнаруженным ошибкам.

Упорядочение вопросов документообразования в САПР позволяет существенно сократить сроки их изготовления, повысить качество и снизить затраты трудовых ресурсов.

Решение большинства задач общинженерного проектирования связано с объемным представлением объекта. Это компоновка оборудования, архитектурно-строительное проектирование, разработка генерального плана, трассировка основных и вспомогательных коммуникаций и т. д. При общем росте технического уровня проектных разработок ведутся интенсивно работы и в этой части проектирования. В результате на новой технической базе совершенствуется метод макетирования, а также развивается техника интерактивной графики на базе ЭВМ.

Макетирование. Объемные прототипы при создании тех или иных объектов были, возможно, самыми ранними средствами инженерных замыслов людей. Зарубежные проектировщики начали интенсивно использовать макетирование в конце 40-х — начале 50-х годов [7]. Первые макеты создавались в основном для проверки разработанных проектов, однако вскоре стало очевидным, что они позволяют весьма успешно предотвратить ошибки, часто возникающие на ранней стадии проектирования. Одно только снижение стоимости строительства за счет исключения проектных ошибок оправдывает применение макетов.

Использование макета в качестве инструмента проектировщика открыло для проектных организаций новые возможности. Руководствуясь технологическими схемами, проектировщики компонуют модели оборудования и выполняют разводку моделей трубопроводов непосредственно на макете, устанавливают модели строительных конструкций, оборудования, КИПиА, опор,

подвесок и т. д. Это позволяет им лучше понять общую идею промышленной установки, проанализировать все аспекты проектирования и строительства, увязывая их во всем комплексе, и тем самым найти наилучшие решения множества вопросов доставки материалов, ведения строительства и монтажных работ.

Макетное проектирование целесообразно не во всех случаях. Стоимость макетов, которая может быть довольно высокой, оправдывает себя, когда сложность проектируемого объекта создает определенные трудности в процессе проектирования с использованием чертежей. Выгоды зависят от количества чертежей, которые заменил макет, точности выполнения и сложности самого макета.

Применение макета при проектировании может значительно сократить стоимость самого процесса проектирования. Опыт показывает [7], что при сооружении большинства нефтехимических и энергетических производств на долю монтажа трубопроводов приходится около половины объема всех работ, от 13 до 20% занимает монтаж оборудования, 10—20% падает на основные строительные работы (например, фундаменты) и от 15 до 20% — на монтаж электросистем и систем автоматизации. Фактическая стоимость проектно-конструкторских работ составляет примерно 45% стоимости проекта, половина этих затрат приходится на проектирование трубопроводов. Многие проектные фирмы называют различные факторы, влияющие на экономическую целесообразность использования макетов, в том числе: а) возможность заставить субподрядчиков согласиться на более низкие цены за выполненные ими работы; б) сокращение общего времени на проектирование и строительство на 10—20%; в) сокращение графической документации на 10—40%; г) экономия средств и материалов за счет сокращения общей длины труб, количества деталей трубопроводов и других элементов. По данным, получаемым со строительных площадок, при строительстве двух производств примерно одинаковой сложности, но спроектированных макетным и графическим методами, в первом переделки составили 2,6% общих затрат времени на монтаж трубопроводов, а во втором — 15,6%. Общая картина соотношения трудозатрат на проектирование графическим и макетным методами от общей стоимости проектируемого объекта приведена на рис. 2.3. Из графика следует, что трудозатраты по семи проектам снижаются на 16% при использовании макетного метода проектирования, что составляет 1,2% от общей стоимости строительства предприятия.

Итак, основными преимуществами использования макетов при проектировании по сравнению с графическим методом являются следующие: а) благодаря наглядности улучшается взаимосвязь и понимание между проектировщиками различных специальностей, заказчиками и исполнителями, что способствует

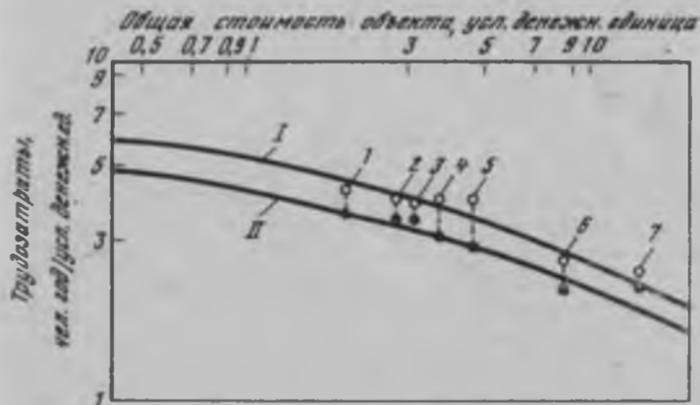


Рис. 2.3. Зависимость трудозатрат на проектирование графическим и макетным методами от общей стоимости проектируемого объекта

I — графический метод; II — макетный метод; 1—7 — количество проектов

повышению качества проектов за счет более полного использования опыта проектирования, а также улучшает координацию работ, ускоряет принятие решений и согласования и в конечном итоге сокращает продолжительность проектирования и строительства объектов; б) имеется возможность более эффективного размещения производства уже на стадии предпроектных работ, увязки частей проекта и согласования, внесения изменений до начала строительно-монтажных работ; в) имеется возможность получения исходной информации для автоматизированного проектирования; г) благодаря опознавательной окраске дает наглядное представление о назначении отдельных узлов, что помогает прорабатывать вопросы обслуживания и ремонта; д) благодаря наглядности макет является учебным средством для подготовки операторов и другого персонала; е) оставаясь в распоряжении строителей на все время строительно-монтажных работ, макет служит эталоном и постоянным справочным материалом.

Типы макетов. Макеты находят самое широкое применение в различных приложениях и отличаются масштабом, детализацией, увязкой с окружающим ландшафтом проектируемых объектов. При проектировании промышленных объектов в химической и смежных отраслях промышленности используются макеты, по существу, заменяющие графическое сопровождение проекта. Это ситуационные планы, компоновочные и проектные макеты.

Макет ситуационного плана используется на самых ранних стадиях разработки проекта. Поскольку здесь не требуется

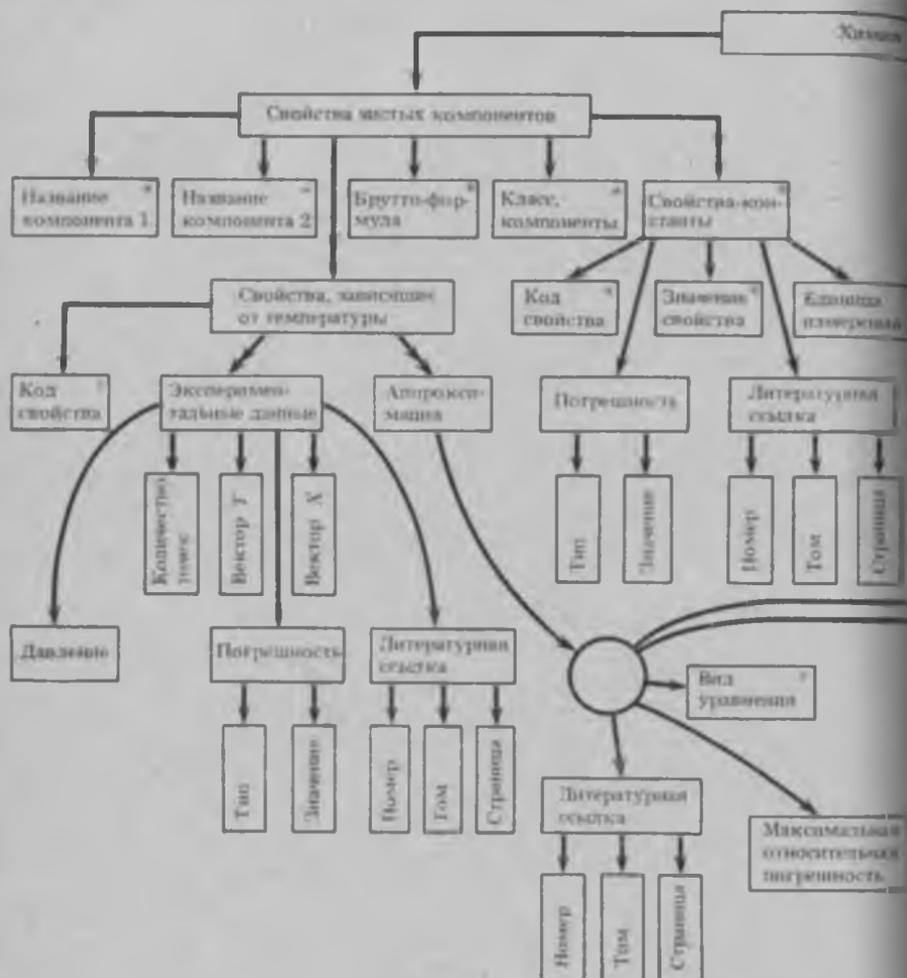
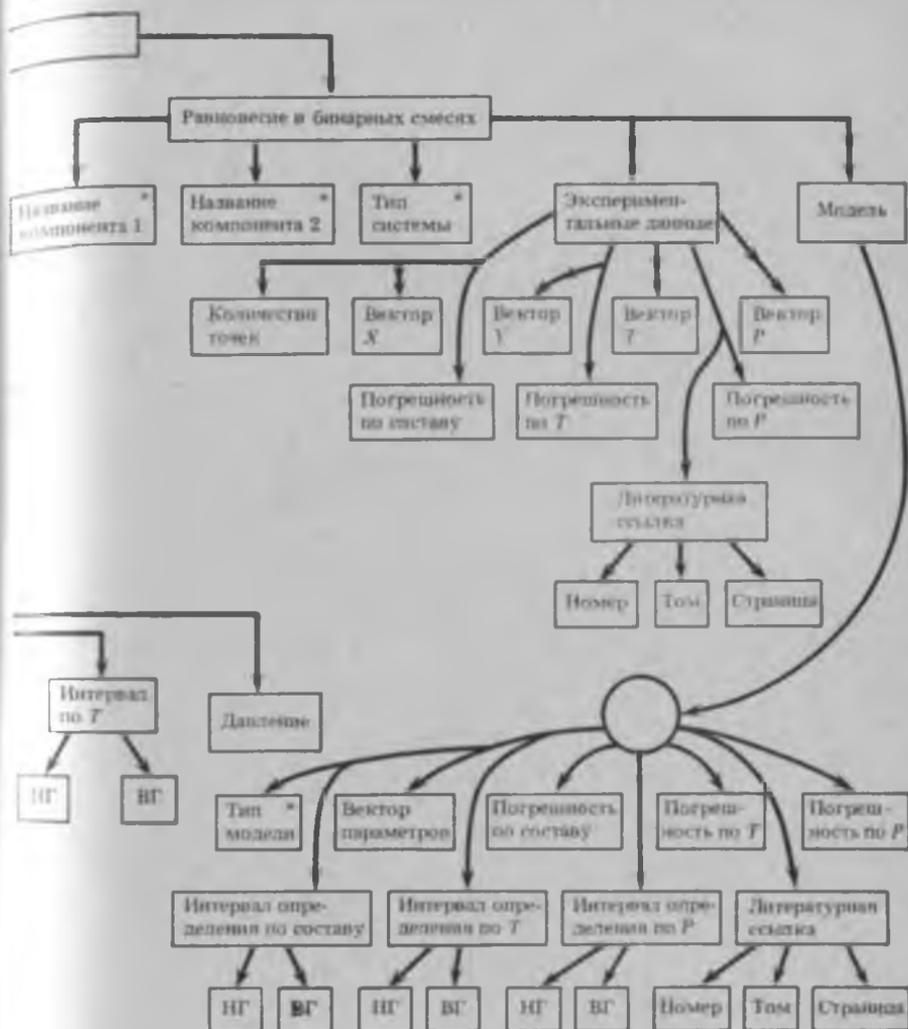


Рис. 5.17. Обобщенная схема базы данных «Химия» (сетевые связи не показаны, НГ, ВГ — нижняя и верхняя границы соответственно)

к другим моделям, например иерархическим и сетевым. При реализации схем, которые прямо не поддерживаются конкретной СУБД, приходится идти на некоторые издержки.

База «Технологическое оборудование» в терминах СУБД КВАНТ-М отображена в один файл с именем STANDART (рис. 5.20). Здесь левая колонка указывает порядковые номера строк (10, 20, 30 и т. д.), вторая — тип поля записи (02 обозначает простое поле, содержащее данные; 01 RG — начало повторяющейся группы, в которую входят все оставшиеся поля). Третья колонка



Содержит имена полей записи, по которым ведется поиск данных в базе. Четвертая и пятая колонки — форма и длина представления данного поля в базе соответственно (ASS указывает на то, что поле является строкой символов в коде ASCII с длиной, указанной в пятом столбце). Содержимое четвертой колонки ASN указывает, что данные будут представлены в машинном коде количеством байт, содержащимся в пятой колонке. Шестая колонка отражает факт принадлежности данного поля к ключевому. Остальные колонки содержат системные характеристики ключевого поля. В этой

подробной детализовки, он может быть выполнен в масштабе 1:100 и мельче. На нем обычно изображаются находящиеся на данной территории мосты, железные дороги, водоемы, реки и все основные строения, примыкающие к проектируемому производству. Макет ситуационного плана позволяет получить общую оценку промышленной площадки и при проработке вариантов увязать проектируемые объекты с природными факторами, такими, как водоемы, рельеф местности, коммуникации.

Компоновочные макеты используются для выбора наиболее рационального варианта расположения зданий и сооружений в соответствии с технологическим процессом. Для его изготовления необходимы следующие исходные данные: перечень оборудования (колони, теплообменников, насосов и т. д.) с указанием их приблизительных габаритных размеров; технологическая схема; технические требования к производственным помещениям.

Проектные макеты создаются с использованием предыдущих и отличаются более тщательной проработкой элементов схемы. На них устанавливаются модели технологического оборудования, емкостей, трубопроводов, электрических коммуникаций, контрольно-измерительных приборов, отопления, вентиляции. Основное назначение проектного макета состоит в разработке оптимальной трассировки трубопроводов при минимальном количестве графической документации.

Проектный макет — это миниатюрная копия проектируемого производства. Законченный макет (рабочий макет) должен содержать все элементы будущего производства (отделения, цеха и т. д.), в том числе модели всех единиц оборудования, трубопроводов, строительных конструкций и других элементов проектируемого производства.

Макетирование промышленных объектов производится в соответствии со стандартами [8, 9], определяющими размеры, маркировку, окраску, форму элементов макета. Для проектного макета принят масштаб 1:50, а для рабочего — 1:25.

Исходные данные для разработки макета. Макет создается на всем протяжении разработки проекта, и исходными данными для его создания являются результаты последовательных этапов проектирования, в первую очередь физические характеристики проектируемых объектов. Поэтому требуется тщательное планирование и строгое соблюдение очередности работ в течение всего процесса проектирования, четков взаимодействия отдельных групп проектировщиков. При этом результаты работы групп всегда видны на макете.

Макетирование не является средством автоматизации проектирования, а лишь методом или приемом, позволяющим путем организации «натурных экспериментов» на физических аналогах упростить процедуру получения документации. Еще более эффек-

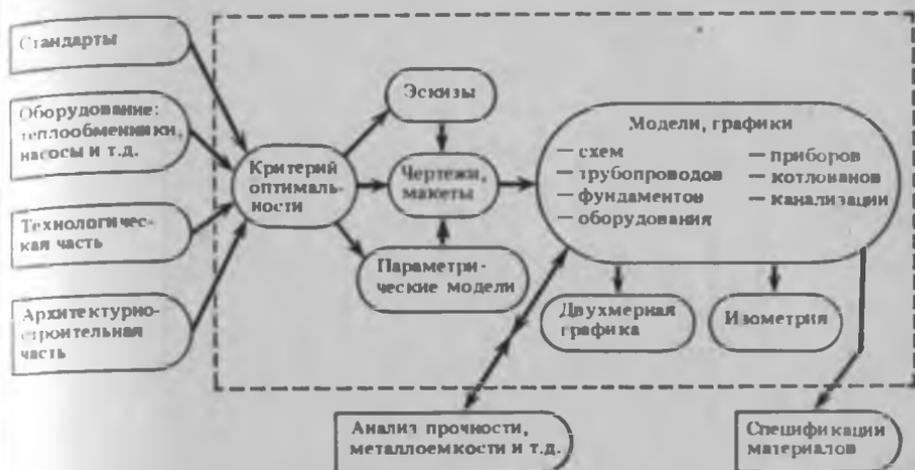


Рис. 2.4. Система трехмерной графики

тивным этот метод становится в сочетании с фото- и киносъемкой. Но неизменным остается его основное достоинство — наглядность. Однако макетный метод в традиционной форме не позволяет количественно оценить качество полученного проектно-конструкторского решения, поскольку при этом используются, как правило, лишь некоторые экспертные оценки, основанные на опыте проектировщиков.

Другим развитием метода макетного проектирования является выполнение деталепровочных чертежей проектируемого объекта в изометрии с помощью ЭВМ. Для этого на макете должны быть проставлены все необходимые типоразмеры, требуемые привязки (координаты) узлов как в плане, так и по высотам. По этой информации ЭВМ генерирует изометрическое изображение проектируемого объекта. Если теперь изображению сопоставить программы оценки затрат на строительные-монтажные работы, материалы (например, трубопроводы), эстакады, дополнительное оборудование (в зависимости от варианта компоновки), то имеется возможность выбора оптимального варианта компоновки, например, по критерию приведенных затрат.

Системы машинной графики. В отличие от макетирования системы машинной графики (в двух- и трехмерном пространстве) позволяют в значительной степени автоматизировать процесс изготовления чертежной документации. Их основу составляют графические дисплеи и графопостроители (подробнее см. гл. 6). Соответствующее программное обеспечение позволяет не только получать изображения проектируемых объектов на экране дисплея или в виде чертежа, но и проводить оптимизаци-

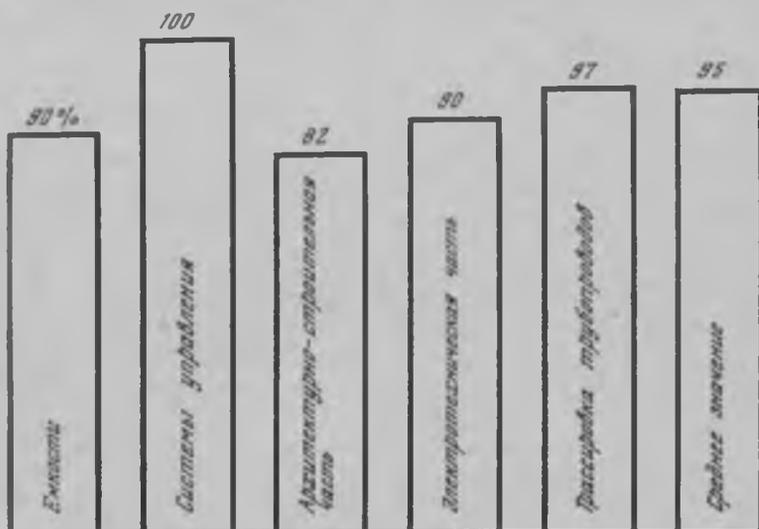


Рис. 2.5. Объем графических работ, выполняемых системой машинной графики

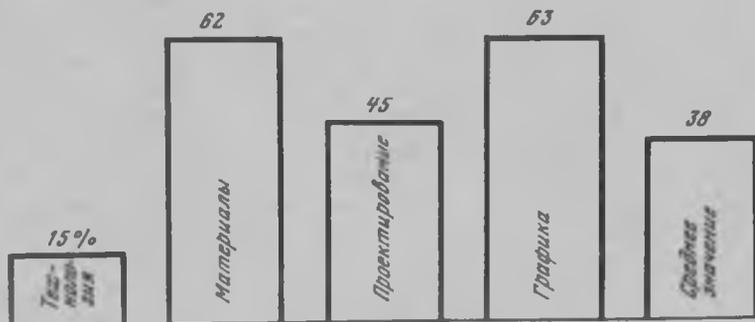


Рис. 2.6. Сокращение объема ручного труда за счет машинной графики

ошные расчеты по выбору оптимальных конструкционных и компоновочных решений. В САПР системы машинной графики обычно реализуются в виде АРМ проектировщика на отдельных мини-ЭВМ и работают в режиме диалога. Совместно с основной ЭВМ они образуют, по существу, вычислительную сеть.

Для эффективной работы АРМ необходима вся информация о проектируемом объекте, которая поступает из баз данных САПР. Характер информации и последовательность ее обработки представлены на рис. 2.4. В качестве входной может служить также и информация с макетов.

В распоряжении проектировщика обычно имеется набор

графических элементов, соответствующих отдельным элементам технологической схемы, конструкциям аппаратов, фрагментам технологических схем. Поэтому проектировщик в диалоговом режиме имеет возможность формировать необходимую технологическую схему, корректировать ее на основе получаемых оценок, выдавать в качестве результатов проектирования. Эффективность систем машинной графики по автоматизации графических работ на отдельных этапах проектирования иллюстрируется на рис. 2.5 и 2.6 [10].

Создание систем машинной графики связано с решением двух проблем: во-первых, с разработкой алгоритмов размещения и компоновки оборудования, и, во-вторых, с разработкой пакетов программ представления графической информации.

Итак, общепромышленное проектирование как этап разработки проекта связан с решением задач не только технологических (обеспечения требуемых условий эксплуатации производства), но и архитектурно-планировочных, строительных, монтажных (выбора современных архитектурных форм, подбора соответствующих строительных материалов и т. д.). Поэтому проект как результат интеллектуальных, творческих усилий огромного коллектива разработчиков должен вобрать в себя достижения во всех областях науки и техники.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Зайцев И. Д.* Теория и методы автоматизированного проектирования химических производств: Структурные основы. Киев: Наук. думка, 1981. 308 с.
2. *Андрианов А. Н., Задыхайло Н. Б., Мямлин А. Н., Поздняков Л. А.* Тенденции в развитии суперЭВМ: Комплексный подход к проектированию суперЭВМ // Прикладная информатика. М.: Финансы и статистика, 1983. Вып. 1. С. 183—197.
3. *Общепромышленное проектирование*. М.: ГКНТ СССР, 1978. 46 с.
4. *Hartvany Y., Newman W. M., Sabin N. A.* World survey of computer-aided design // Comput.-Aided Design. 1977. Vol. 9, N 2. p. 79—107.
5. *Федоров В. В., Телков Ю. К., Фалькевич Г. С., Барашков Р. Я.* Основные принципы создания системы автоматизированного оптимального проектирования производств нефтехимии и нефтепереработки // Автоматизированное проектирование производств. М.: В/О «Нефтехим», 1975. Вып. 9. С. 7—21.
6. *Статюха Г. А., Кисиль И. М., Браславский П. И.* Системное проектирование химико-технологических комплексов. Киев: Техника, 1983. 120 с.
7. *Леймит Л.* Макетное проектирование. М.: Мир, 1984. 336 с.
8. ГОСТ 2.803—77. ЕСКД. Макетный метод проектирования. Требования к конструкции и размерам макетов и моделей.
9. ГОСТ 2.804—74. ЕСКД. Макетный метод проектирования. Геометрическая форма, размеры изделий.
10. *Brcen W. S., Bullock R. H., Poulter B. S., Terry R. M.* Plant modeling and computer aids reduce engineering costs // Chem. Eng. Proc. 1984. N 8. P. 33—39.

Глава 3

ПРОЕКТИРОВАНИЕ АВТОМАТИЗИРОВАННЫХ СИСТЕМ
НАУЧНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Фундаментальные и прикладные исследования на современном этапе развития науки связаны с огромным количеством поступающей информации, выполнением большого числа экспериментальных работ. Организация сбора, обработки, хранения и анализа этого потока данных традиционными способами не может удовлетворить потребности теоретических и прикладных работ ни по точности, ни по оперативности получения. Современная фундаментальная наука анализирует явления на атомарно-молекулярном уровне, и для их идентификации необходима очень высокая точность. Что касается прикладных наук, то, помимо точности, получаемая информация должна обладать свойствами доступности, полноты и оперативности, с тем чтобы способствовать скорейшему внедрению разработок в промышленность.

Любое научное исследование представляет собой последовательный процесс, результатом которого является новая информация, необходимая для решения определенной проблемы. Функциональная схема, представляющая основные этапы современного научного исследования, непосредственно связанного с промышленным производством, приведена на рис. 3.1 [1].

Научное исследование начинается с постановки задачи, в которой формально определяется подлежащая решению научная проблема, намечаются сроки проведения работ и ресурсы, отводимые для этой цели.

Следующий этап — поиск, систематизация, обобщение и анализ существующей первичной информации — в основном связан с библиографическими исследованиями.

На основе имеющейся информации разрабатываются априорные гипотезы, предположительно описывающие исследуемое явление и не противоречащие до сих пор известным фактам. Выбираются критерии оценки результатов исследования, методы и средства его проведения для проверки и уточнения априорных гипотез.

Далее развитие идет по двум руслам: теоретическая и экспериментальная части научного исследования. Являющееся предметом рассмотрения экспериментальное исследование проводится либо как наблюдения в естественных условиях, либо как исследования методами физического моделирования. При использовании методов моделирования значительную роль играет планирование эксперимента. Задача планирования эксперимента состоит в организации изменений условий (активных воздействий на исследуемое явление) эксперимента таким образом, чтобы кратчайшим путем и в достаточном количестве получить информа-

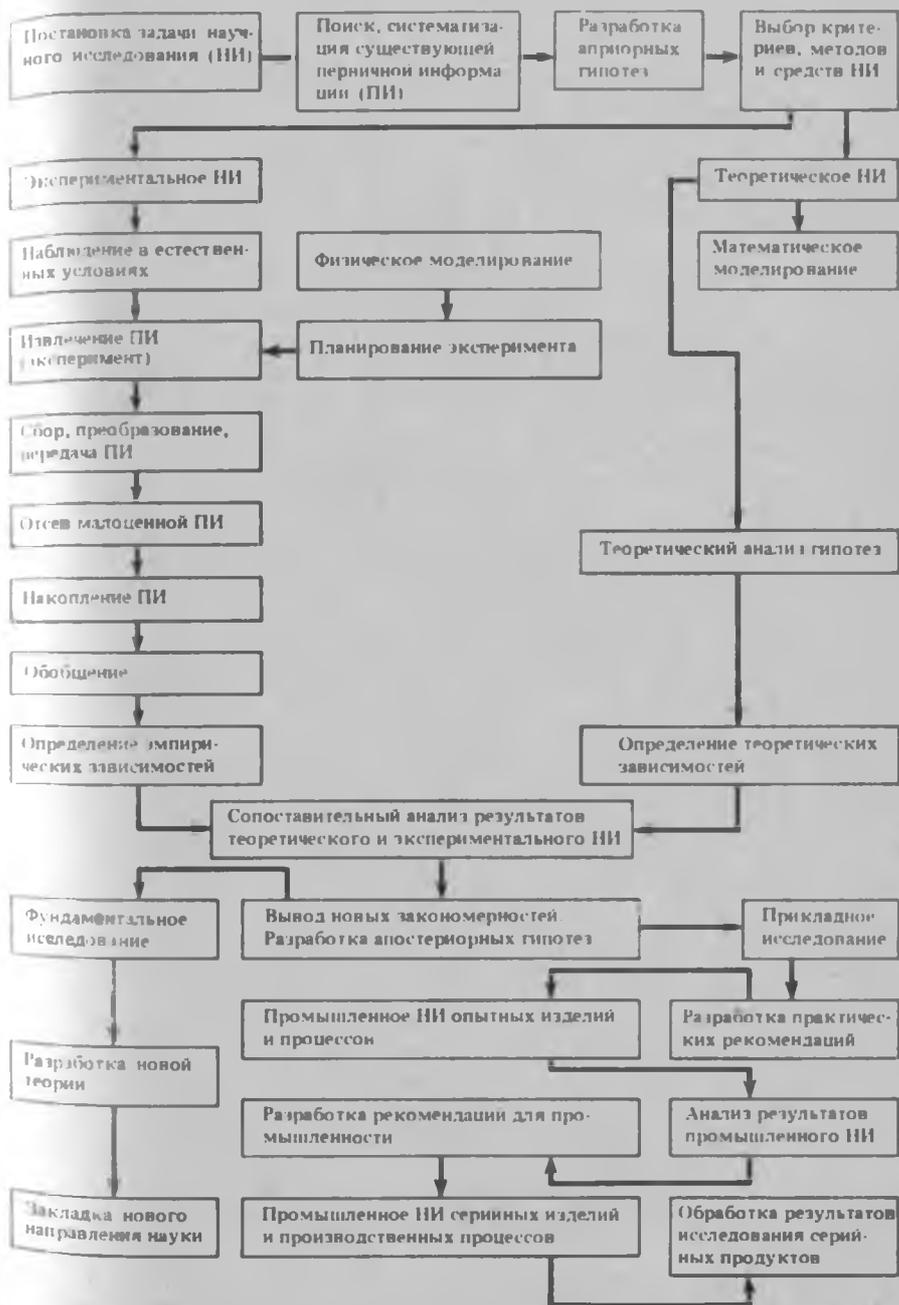


Рис. 3.1. Этапы современного научного исследования

цию, характеризующую объект исследования с заданной достоверностью.

Полученная информация должна быть собрана, а в необходимых случаях преобразована к требуемому виду. Современные средства извлечения данных часто имеют очень высокую информативность, благодаря чему можно достаточно быстро провести всестороннее исследование. Однако при этом наряду с полезной информацией накапливается значительное количество малоценных данных, которые должны быть отсеяны. «Обогащенная» таким образом информация накапливается с целью облегчить требуемую полноту описания исследуемого явления. Далее для повышения объективности первичной информации ее обобщают. На основе математической обработки этой информации определяют эмпирические зависимости, характеризующие исследуемое явление.

В зависимости от поставленной задачи научное исследование может быть фундаментальным или прикладным. Фундаментальное исследование ведет к разработке новой теории и в некоторых случаях к закладке нового направления науки. Цель прикладного исследования (которым является большей частью исследование в области химической технологии) — разработка практических рекомендаций для промышленного производства. С учетом этих рекомендаций выпускаются опытные образцы продукции, которые подвергаются промышленным испытаниям. На основе анализа их результатов разрабатываются рекомендации для промышленного производства. Далее проводится исследование для уточнения математического описания и, главное, для того, чтобы убедиться в решении поставленной задачи научного исследования.

Даже из упрощенной схемы научного исследования видно разнообразие процессов, из которых оно состоит. При этом многие этапы исследования, и часто самые важные, носят творческий характер, т. е. зависят от эрудиции и таланта исследователя. Обращает на себя внимание объем получаемой информации и сложность ее обработки.

Развитие средств вычислительной техники, математического и программного обеспечения, средств контроля и управления создали основу для совершенствования экспериментальных исследований в смысле сбора, обработки, хранения и анализа получаемых данных. В различных отраслях, и прежде всего в области фундаментальных исследований, стали создаваться АСНИ. В химической технологии первыми примерами таких систем, пожалуй, являются системы снятия и расшифровки (идентификации) хроматограмм.

Под АСНИ понимается система научных исследований, в которой с целью повышения эффективности операции (получение, анализ, передача и хранение информации), непосредственно свя-

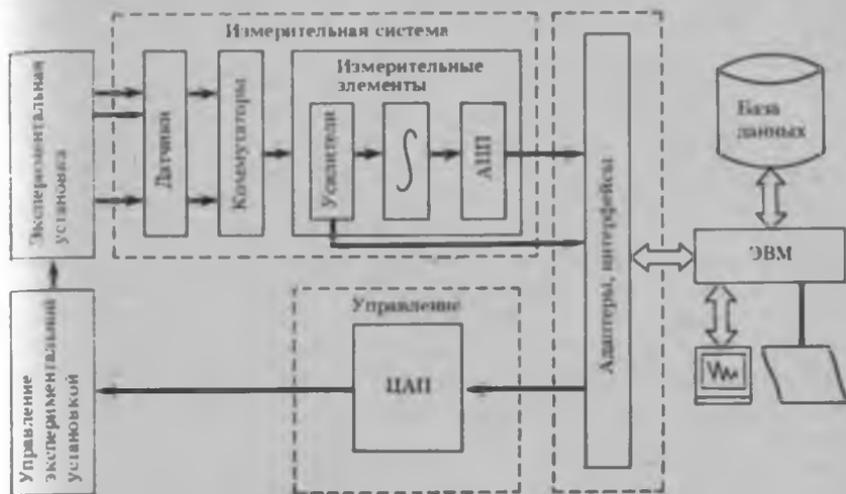


Рис. 3.2. Структура АСНИ

занные с использованием ЭВМ и метода математического моделирования, формализованы и выполняются автоматически техническими средствами системы под управлением исследователя.

Если рассмотреть типовую АСНИ (рис. 3.2), то можно выделить несколько ее основных частей [2, 3]. Имеется экспериментальная установка, воспроизводящая исследуемый процесс или явление. Это может быть также имитационная модель, реализованная на ЭВМ. Процесс должен воспроизводиться при определенных значениях его параметров. Для задания и стабилизации значений этих параметров объект снабжается системой управления.

Следующей по основному потоку движения информации является измерительная система. Измеряемыми величинами в экспериментальных исследованиях обычно являются физико-химические данные (концентрация, температура, давление, вязкость и т. д.). Первоначальными источниками информации о значениях измеряемых величин служат датчики. Они чаще всего выдают сигнал в аналоговой форме (непрерывный во времени). Если сигнал от датчика не является электрическим, то его стараются преобразовать в электрический (токовый или потенциальный), если он слабый, то усиливают.

Сигналы от датчиков поступают в измерительные элементы, которые имеют, как правило, цифровую индикацию и цифровое представление результатов на выходе. Для этого аналоговые сигналы преобразуются в цифровые с помощью аналого-цифрового преобразователя (АЦП). Для управления экспериментальной установкой цифровая информация, как правило, преобразуется в ана-

логовую с помощью цифроаналогового преобразователя (ЦАП). Иногда при практической реализации системы с целью экономии оборудования одни и те же измерительные элементы могут обслуживать большое число датчиков. Поочередное подключение датчиков к усилителю и измерительной части осуществляется коммутаторами.

Следующей частью системы является узел обработки и управления. Он включает в себя ЭВМ (мини- или микроЭВМ) и систему математического обеспечения. ЭВМ снабжена устройствами ввода — вывода и средствами общения с экспериментатором.

Таким образом, АСНИ представляет собой сложный комплекс технических и программных средств, работающий в реальном масштабе времени, причем технические средства обеспечивают не только обработку информации, но и связь с объектом исследования.

В химической технологии эксперименты могут проводиться на нескольких уровнях, а именно: а) лабораторные исследования, целью которых является определение физико-химических характеристик процесса (явления), свойств веществ и соединений, отработка теоретических предположений; б) исследования на опытных установках с целью выбора типов аппаратов, разработка технологического регламента, изучения динамики объекта (выбора каналов управления); в) исследования на промышленных установках с целью оптимизации технологических и конструктивных параметров объекта, совершенствования технологии и оборудования; г) исследования на математических моделях с целью выбора оптимальных условий эксплуатации процесса, отработки алгоритмов управления, выбора связей между отдельными частями системы и т. д.

На каждом из уровней эксперимент имеет свои особенности, связанные со структурой и характером информационных потоков, математическим и техническим обеспечением и возможной степенью автоматизации. Следует особо подчеркнуть, что выполнение натуральных экспериментов помимо всего прочего имеет целью разработку или уточнение математических моделей соответствующих объектов. Во всяком случае, одной из конечных целей исследований химико-технологических процессов как системы является получение данных, необходимых для проектирования промышленной установки (или ее реконструкции): по аппаратурному оформлению, по структуре связей между аппаратами (или группами аппаратов), по структуре системы управления.

3.1. Экспериментальные исследования в САПР

Проектирование объектов химической технологии нуждается в огромном количестве исходных данных, особенно на стадии научно-исследовательских работ (составления регламента). Эти данные

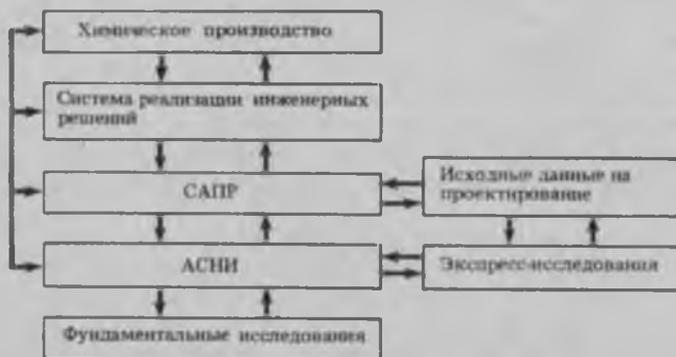


Рис. 3.3. АСНИ в структуре системы проектирования химического производства

самой различной природы (каталоги, прейскуранты, ГОСТы и т.п.), но среди них можно выделить такие, которые являются оригинальными для вновь создаваемого производства и должны быть либо рассчитаны, либо определены экспериментально. К ним принадлежат данные о физико-химических, термодинамических и теплофизических свойствах новых веществ и соединений, данные по фазовому равновесию, гидродинамические и кинетические параметры структуры потоков и явлений массопереноса в аппаратах, кинетические параметры химических реакций. Точность и оперативность получения этих данных определяет качество проектных разработок и сроки выполнения проекта в целом.

Система обеспечения научно-технического прогресса в химической промышленности предусматривает научные исследования в качестве непеременимого элемента [4]. САПР в своем развитии должна ориентироваться на получение необходимых данных с помощью АСНИ, для чего последняя должна входить в структуру САПР в качестве подсистемы. В этом случае функции АСНИ весьма широкие — от выполнения экспресс-исследований для получения текущих значений параметров и до фундаментальных исследований по развитию теоретических основ процессов (рис. 3.3).

С позиций создания АСНИ комплекс задач можно разделить на два класса: собственно исследование процессов и ХТС и исследование физико-химических свойств веществ и материалов.

Исследование процессов и ХТС может проводиться на всех уровнях экспериментирования (на лабораторной, пилотной и промышленной установках, на математической модели) и имеет целью получение более полной информации об объекте, а также разработку и коррекцию математических моделей. В общем случае задача заключается в определении параметров C математической модели $Y = Y(X, K, C, U)$; $Y \subset M$, где Y —

вектор выходных переменных (интенсивность потоков продуктов и энергии); X — вектор входных переменных (количества и составов исходных продуктов, параметров режима работы аппарата и т. д.); K — вектор конструкционных параметров аппаратов (высоты, объема, числа контактных ступеней и т.д.); U — вектор управляющих переменных (потоков вещества, параметров режима); M — множество возможных математических описаний элемента или ХТС.

Для определения параметров необходимо выполнить большое количество экспериментов при различных значениях управляющих переменных. Эти данные используются для решения задачи оптимизации, например поиска минимума критерия эффективности P (приведенных затрат, рассогласования экспериментальных и расчетных данных и т. д.):

$$P = \min_{u, c} (Y^P, Y^o, C, U).$$

Для снижения количества экспериментов при решении задачи оптимизации обычно применяются методы планирования эксперимента [5].

Методологически задача выполнения научных исследований для оценки параметров (или выбора) модели процесса или ХТС состоит из нескольких этапов, а именно: а) задания некоторого множества моделей объекта на основе фундаментальных законов (закономерностей) или априорной информации; б) разработка структуры, состава, элементов, системы управления и изготовления экспериментальной установки; в) планирования и проведения экспериментов на установке; г) обработка экспериментальных данных для идентификации модели (определения параметров); д) выдачи модели процесса или ХТС на стадию проектирования. При неудачном выполнении одного из этапов в указанной последовательности цикл действий может повторяться с любого из этапов, т. е. длительность проведения эксперимента и обработки результатов зависит от четкости его постановки, корректности математического обеспечения и уровня автоматизации.

Вряд ли стоит выделять классы объектов, нуждающихся в немедленном применении АСИИ. Автоматизация эксперимента необходима там, где проводится эксперимент (или возникает необходимость в его проведении). Автоматизация научных исследований является одной из составляющих научно-технического прогресса, повышения технической культуры эксперимента, расширения интеллектуальных и технических возможностей экспериментатора. Сдерживающими факторами повсеместного внедрения этой идеологии являются отсутствие соответствующих вычислительных и измерительных средств (технической базы), программного обеспечения, да и неподготовленность самого экспериментатора.

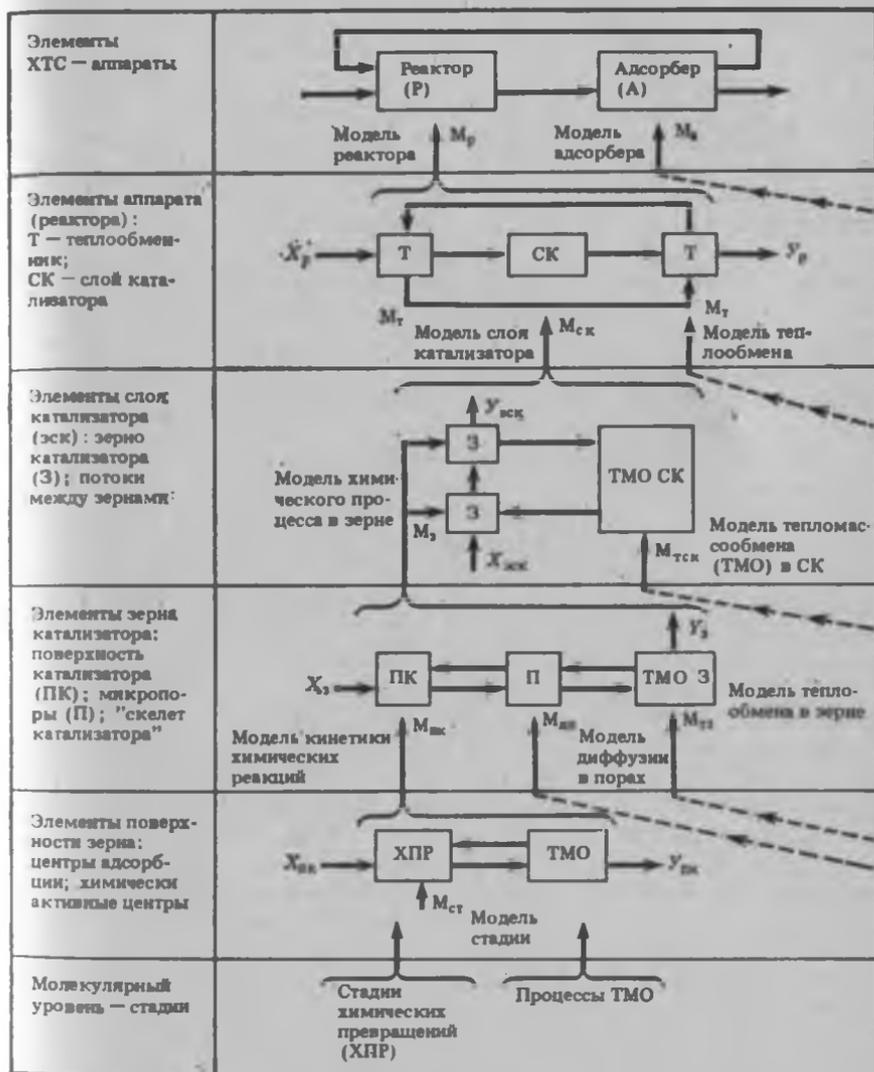


Рис. 3.4. Декомпозиция процесса исследования каталитического реактора

В общем случае задача построения математической модели процесса (ХТС) с активным использованием АСНИ, основанная на стратегии системного анализа, заключается прежде всего в выделении уровней иерархии строения ХТС, а именно: элементарных процессов (кинетики химических превращений, фазовых равновесий и т.п.); явлений в аппаратах (реакторах, абсорберах,

ректификационных колоннах): тепломассопереноса, химического превращения, фазовых превращений и т. п.; ХТС в целом.

В соответствии с этим выделяются и уровни экспериментальных исследований, выполняемых интегрированной или распределенной АСНИ. Так, при исследовании каталитического реактора стратегия выделения уровней исследования (и соответственно проведения экспериментов) приведена на рис. 3.4. [6]. Всего выделяется шесть уровней иерархии: элементы ХТС, аппаратов, слоя катализатора, зерна катализатора, поверхности зерна катализатора и молекулярный уровень. Эта структура является типичной при построении математических моделей процессов химической технологии.

Очевидно, исследования на отдельных уровнях требуют различного инструментального оснащения. Поэтому и АСНИ будут подразделяться по основным процессам ХТС.

Важным выводом из анализа последовательности построения модели процесса является то, что исходя из ограниченного набора элементарных процессов (явлений) создается огромное количество различных технологических процессов (аппаратов) и ХТС. Таким образом, с позиций создания АСНИ также можно исходить из ограниченного инструментального оснащения (например, приборов контроля параметров) для построения разнообразных специализированных комплексов АСНИ.

Исследование физико-химических свойств веществ и материалов является самым распространенным типом экспериментов в химической и смежных отраслях промышленности. Существующие расчетные методы редко обладают необходимой точностью и в большинстве своем носят полумпирический характер, требуя для определения параметров опять же экспериментальных данных (см. гл. 5). Ни проектирование, ни проведение других исследований (кинетики химических реакций, кинетики массопереноса и т. д.) не возможны без достоверных данных по физико-химическим свойствам.

Экспериментальные установки по определению свойств веществ и соединений отличаются сложностью, а сам процесс получения необходимых свойств — длительностью во времени (и, следовательно, трудоемкостью), необходимостью поддержания заданных условий проведения эксперимента (по температуре, давлению и т. д.). К тому же во многих случаях анализ полученных результатов представляет собой сложную вычислительную задачу (например, расшифровка хроматограмм, ЯМР-спектров, молекулярных структур и т. д.). Получить достоверные данные традиционными методами в таких случаях практически невозможно.

Такие экспериментальные установки представляют собой сложные комплексы с развитой программой, выполняемой в автоматическом режиме. Так, система автоматизации спектрометра SAS-11, управляющая рентгенофлуоресцентными и эмиссионными спект

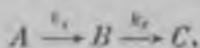
рометрами, выполняет следующие основные функции [7]: а) подготовку анализов путем задания через блок управления номеров программ и пробы; б) управление квантометром: выбор стандарта и условий возбуждений, включения аттенюаторов, дискриминаторов, диафрагм и фильтров; в) коррекцию интенсивностей для учета смещения линий (соответственно интенсивностей введенной пробы), интерференций линий, хода монохроматора и т. д.; г) расчет концентраций с помощью полиномов (от первой до третьей степени) или полиномов эталонных кривых; д) выдачу концентраций по отдельным анализам на визуальном индикаторе, контроль повторяемости, среднее значение любого числа анализов, оформление результатов анализа с указанием календарного времени, номеров программ и пробы; е) автоматическую организацию хранения данных анализа, расчет параметров функциональных зависимостей.

Наиболее хорошо разработанными системами, в которых органично связаны аспекты моделирования и экспериментальных исследований, являются АСНИ для анализа молекулярных структур [8]. Научной основой разработки таких систем являются работы в области квантовой химии и спектроскопии. Стратегия исследования молекулярных структур новых веществ в АСНИ построена следующим образом. Из первоначального эксперимента определяется брутто-формула и наличие характерных групп атомов (на основе спектроскопических корреляций) в исследуемом химическом соединении. Затем по этим данным на ЭВМ производится автоматический синтез вариантов гипотетических молекулярных образований с использованием ряда аксиом о запрещенных сочетаниях атомов (правил валентности). Для синтезированных вариантов молекул, в которых встречаются обнаруженные экспериментально характерные группы, на основе квантово-химических моделей производится расчет (моделирование) колебательных спектров гипотетических синтезированных молекул. Сравнением рассчитанных и измеренных спектров выбираются наиболее вероятные структуры. По выбранным структурам после более тщательного моделирования спектров с учетом вариантов пространственного расположения атомов и дополнительного экспериментального исследования уточняется пространственное расположение атомов в молекуле.

Экспериментальные установки для определения свойств веществ обычно отличаются принципом действия, типом выходных данных, способами анализа и отбора выходных данных. Вряд ли целесообразно на базе каждой из установок создавать АСНИ. Система исследования свойств веществ должна строиться как совокупность отдельных приборов (возможно, различных типов для определения одних и тех же свойств). Это направление особенно эффективно в научно-информационных центрах по сбору и анализу свойств.

Создание систем, объединяющих и обеспечивающих проведение экспериментов на приборах различного типа, позволяет существенно повысить достоверность получаемых результатов, поскольку имеется возможность проводить сравнительный анализ данных, полученных различными способами, использовать комбинированные методы оценки, многоколонные и многодетекторные перенастраиваемые приборы (хроматографы, масс-спектрометры). Использование многоколонной и многодетекторной системы позволяет анализировать на одной и той же аппаратуре как входные смеси, так и выходные (например, при исследовании реакторов), что обеспечивает максимальную точность измерений (влияние ошибок измерений уменьшается за счет применения в моделях результатов измерений входов и выходов).

Точность измерений. Ценность результатов исследований зависит от точности используемой информации. Недостаточная точность может быть причиной получения недостоверных результатов, а последнее — причиной неправильных выводов. Поэтому требования к точности АСНИ значительно выше, чем к точности промышленных информационно-измерительных систем. Для большинства промышленных каталитических процессов существенным усовершенствованием является повышение избирательности на 2—3% и (или) производительности в 1,2—1,5 раза. Это означает, что при испытании катализаторов для того, чтобы обеспечить надежность его выбора, необходимо экспериментально измерить эти характеристики с погрешностью не более 0,2—0,5% и 1—3% соответственно [9]. С такой же точностью должны быть предсказаны технологические показатели работы промышленного реактора. Для реакции



протекающей в изотермическом реакторе вытеснения, из анализа погрешностей следует, что при степени конверсии $x = 0,95$ и избирательности $S = 0,80$ и вариациях последних в диапазоне $\pm 0,005$ константа k_1 должна быть определена с точностью не хуже 3,5%, а k_2 — 6%. Если такая точность не достигнута, то необходимо провести дополнительные измерения.

Неопределенность значений параметров модели, найденных на основе экспериментальных данных, зависит от методики и точностных характеристик измерительных средств. Основными источниками погрешности являются неполное соответствие реального лабораторного прибора принятой его математической модели; погрешности вычислений выходных параметров по результатам измерений; погрешности поддержания режимных параметров (температур, потоков, состава и т. п.); погрешности измерения концентраций, потоков, объемов, интервалов времени, свойств и т. д.;

погрешности, связанные с представительностью исследуемого образца.

Ввиду сложного характера распространения ошибок, необходимо при разработке методик определения параметров и математических моделей стремиться к использованию результатов прямых измерений. Естественно, что измерительная аппаратура должна обладать высокими метрологическими характеристиками.

Полнота информации. Несмотря на значительные различия в качественном составе, объеме и условиях получения информации, необходимой для решения конкретной технологической задачи, можно отметить основные требования по полноте проведения экспериментов: а) исследования должны охватывать по возможности широкую область изменения параметров, поскольку модели в большинстве случаев обладают плохими прогнозирующими свойствами (особенно эмпирические); б) при определении составов продуктов химической реакции, ректификационной колонны, экстракции и т. д. необходимо по возможности идентифицировать каждый компонент смеси, поскольку это имеет принципиальное значение при проектировании химического производства и определяет структуру технологической схемы (выбор аппаратов, организацию рециклов, рекуперацию энергии и т. д.); объединение индивидуальных компонентов в групповые не должно производиться в эксперименте; в) для повышения достоверности идентификации моделей необходимо иметь возможность прямого измерения промежуточных параметров процесса (например, концентрацию адсорбированных на поверхности катализатора веществ). Соответственно и методики обработки экспериментов должны учитывать эти возможности.

3.2. Принципы построения АСНИ в химической технологии

Развитие АСНИ в значительной степени обязано совершенствованию инструментальной и вычислительной техники, разработке эффективных средств преобразования информации. Особенно бурное развитие этого направления обусловлено проникновением микропроцессорной техники в аналитическое приборостроение, что привело к появлению приборов, неотъемлемой частью которых стали специализированные ЭВМ на базе микропроцессоров; это переложило на них не только задачи обработки данных и анализа, но и управление работой самого прибора.

Современные АСНИ как в химической технологии, так и в других отраслях выполняют обширный круг типовых функций по организации экспериментальных работ [10, 11]: а) сбор и преобразование информации: измерение (первичное преобразование информации), вторичное преобразование (чаще всего в электрическую форму), предварительную обработку информации (обычно фильтрацию аналоговых сигналов), преобразование в цифровую

форму (квантование по уровню и дискретизацию во времени), сжатие информации (устранение статистической избыточности), преобразование для передачи по каналам связи, калибровку измерительного тракта; б) обработку информации: первичную дополнительную фильтрацию, линеаризацию, учет данных калибровки измерительного тракта, устранение временных трендов и т. д.; основную обработку, занимающую центральное место в цепи преобразования исходных данных, характер которой полностью определяется целями и задачами исследования; дополнительную обработку (с привлечением результатов предыдущих этапов исследования, статистический анализ серий экспериментов и т. д.); в) представление исходной информации и результатов обработки: оперативное (в ритме поступления данных), конечное (по завершении исследования или какой-либо его части); г) накопление информации: оперативное (для текущей обработки), для длительного хранения; д) интерпретация результатов: сравнение с теоретической моделью, выявление некоторых следствий из полученных результатов обработки для последующей экспериментальной проверки, сопоставление с полученными ранее известными результатами; е) контроль и управление экспериментом: контроль за работой экспериментального оборудования и всей АСНИ, программное управление экспериментом (по жесткой заранее составленной программе), последовательное управление экспериментом (непрерывную коррекцию программы в ходе эксперимента с учетом результатов очередного опыта).

Исходя из перечисленных типовых функций АСНИ и тенденции современного их развития, можно с достаточной степенью обоснованности сформулировать три определяющих принципа построения той или иной конкретной системы — иерархичность структуры, типизация решения и расширяемость.

Принцип иерархичности структуры АСНИ непосредственно следует из декомпозиции исследуемого объекта на отдельные уровни иерархии. Такое представление объекта (соответственно и АСНИ) позволяет, во-первых, сосредоточить внимание на анализе задач каждого уровня, и во-вторых, выявить наиболее существенные факторы, характеризующие взаимосвязь уровней. По существу, иерархическая структура является алгоритмом решения задачи разработки модели или АСНИ.

Принцип типизации решений предполагает создание АСНИ для некоторого класса процессов (или ХТС), обладающих общими признаками, а также использование типовых программных и измерительных элементов. Такие АСНИ представляют собой проблемно-ориентированные комплексы, характеризующиеся определенной конфигурацией, методическим, техническим, программным, информационным и организационно-правовым обеспечением. Главными признаками объединения «типовых» экспериментов в группы являются функциональная общность, иден

тичность алгоритмических структур, близкие средние интенсивности информационных потоков, поступающих от объекта в систему.

Принцип расширяемости (открытости) предполагает развитие системы путем расширения функций, совершенствования технических и программных средств.

Поскольку АСНИ является программно-техническим комплексом, к ней применимы практически все положения, касающиеся разработки программного обеспечения, как общесистемные (см. гл. 2), так и специализированные (см. гл. 4). Что касается технических средств, то следует отметить принципы, предполагающие сокращение затрат времени на полный цикл исследований.

Принцип обеспечения максимальной универсальности экспериментальной части АСНИ предполагает использование специальных объектов для проверки инвариантности элементов модели и инструментальной части.

Принцип использования динамической стратегии исследований предполагает, что операции натурных и вычислительных экспериментов объединяются в итеративную поисковую процедуру (эволюционный процесс исследований) таким образом, что первые находятся под управлением вторых (по конечной цели исследований).

Опыт создания АСНИ свидетельствует о преимуществах разработок в области теории систем переработки информации в отношении структуры, программного обеспечения, технических средств. В смысле технических средств может оказаться полезным и опыт, накопленный в области разработки АСУТП в реальном масштабе времени. Специфика АСНИ состоит в том, что требуемые устройства (датчики, усилители, преобразователи, регуляторы, исполнительные механизмы) должны быть более высокой точности и быстродействия. АСНИ ориентирована на получение исходной информации для многих последующих приложений, и требования к точности информации должны быть выше требований вторичного использования.

3.3. Программное обеспечение АСНИ

Эффективность применения вычислительных средств в научных исследованиях в значительной степени определяется свойствами прикладного математического обеспечения, стоимость создания которого для вычислительных комплексов весьма высока и далее непрерывно возрастает. Анализ использования типовых (ранее разработанных) ППП свидетельствует о довольно низком уровне их повторного приложения. Так, для больших ЭВМ повторно используются примерно 40% ППП, для средних — 18% и для малых — 11%. Вызвано это тем, что попытки повторного применения обычно приводят к таким изменениям в программах, при которых стоимость переработки становится сравнимой со сто-

имостью разработки новых. Кроме того, на уровень использования программного обеспечения существенно влияют сроки разработки и внедрения системы. Они соизмеримы со сроками морального износа технической базы и основных научно-технических решений.

Повышение эффективности использования прикладного программного обеспечения возможно, во-первых, при сохранении программной совместимости вновь разрабатываемых элементов вычислительной техники (что особенно актуально для микропроцессоров) и, во-вторых, за счет распределения затрат на разработку и реализацию программных систем на возможно большее число пользователей благодаря их проблемной ориентации и повышению уровня интеллектуальности. Интеллектуальность ППП оспаривает возможность настройки его на решение конкретной задачи. При этом весьма большое значение имеет выбор границ проблемной ориентации программного обеспечения. С одной стороны, желательно, чтобы область применения настраиваемого без дополнительного программирования математического обеспечения была возможно более широкой, а с другой — такое стремление может чрезвычайно усложнить это обеспечение. Выбор оптимальных границ проблемной ориентации сводится к нахождению разумного компромисса между этими противоречивыми требованиями.

Повышение уровня интеллектуальности программного обеспечения предъявляет определенные требования к его организации. Прежде всего, оно должно представлять собой единую систему, а не набор автономных программ для решения отдельных задач. Это требование приводит к идее модульного программирования, при котором программное обеспечение представляется в виде множества программных модулей и средств управления ими при решении конкретных задач. Естественно, интеллектуальность пакета (или ее основные признаки) может быть достигнута при наличии развитого математического обеспечения объекта (группы объектов).

При создании АСНИ проблемная ориентация должна проводиться как по программному обеспечению, так и по техническим средствам. Для этого предварительно необходимо принять решения по выделению группы объектов автоматизации и по функциональной структуре системы. Типичный алгоритм проблемной ориентации АСНИ приведен на рис. 3.5.

На первой стадии (на основании данных экспертных оценок) выявляется структура научных исследований и формируется совокупность научных экспериментов, обладающая рядом общих признаков. На второй стадии проводится анализ информационных потоков от объекта к системе, алгоритмической структуры, источников эффективности автоматизации объекта. Исследованию выделенной части совокупности «типовых» экспериментов как объектов автоматизации направлено на формирование задач АСНИ и технических требований к ней.

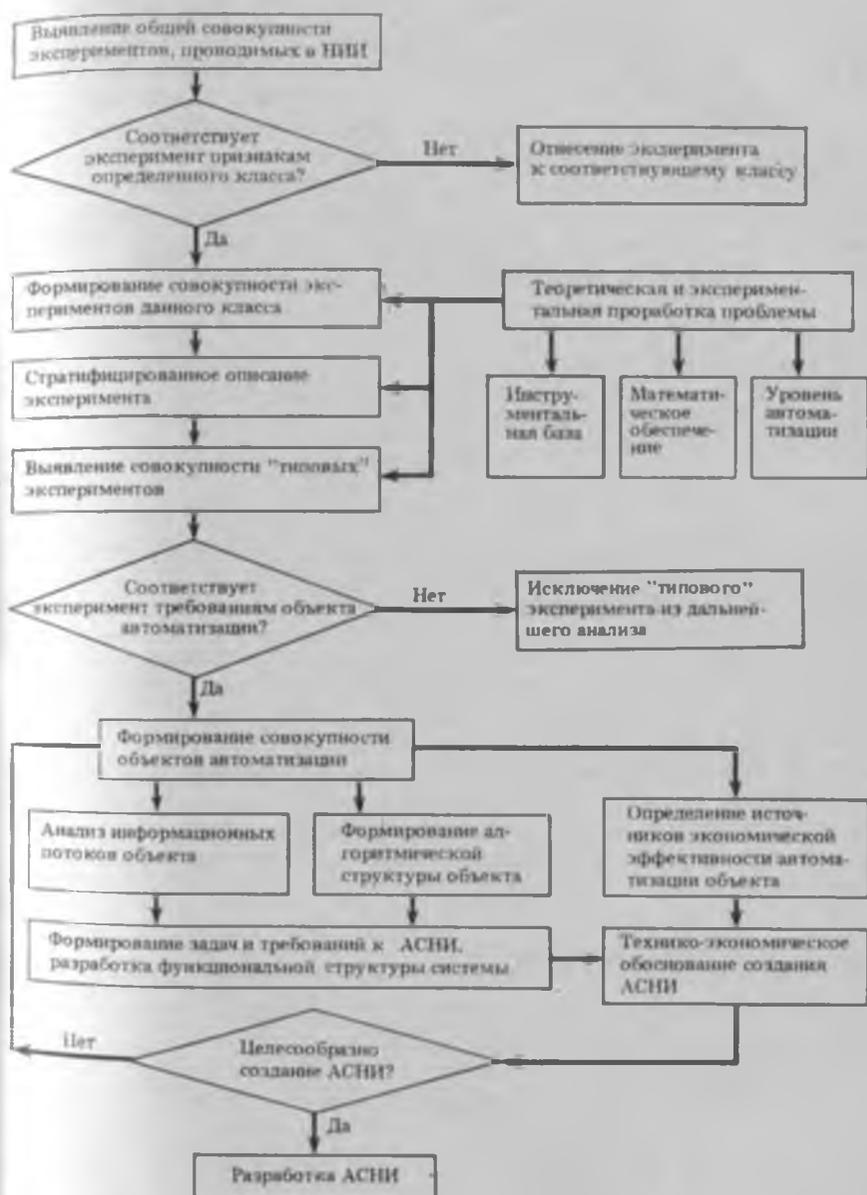


Рис. 3.5. Последовательность решения задачи проблемной ориентации АСНИ

В соответствии с функциями АСНИ программное обеспечение P состоит из ряда функционально ориентированных множеств алгоритмов, а именно: S — алгоритмов сбора и обработки экспериментальных данных (планирования эксперимента, статистических методов описания объекта и т. д.); M — проблемно-ориентированных алгоритмов, определяющих последовательность основной обработки информации (разработки модели, уточнения параметров и т. п.); C — алгоритмов, обеспечивающих контроль и управление экспериментом. Тогда программно-алгоритмическое обеспечение АСНИ есть совокупность всех множеств, т. е.

$$P = \bar{M} \cup \bar{S} \cup \bar{C}.$$

Практически формирование каждого из множеств производится из двух источников — из фонда алгоритмов и из специальных разработок (например, для проблемно-ориентированного множества — M и M' соответственно), т. е.

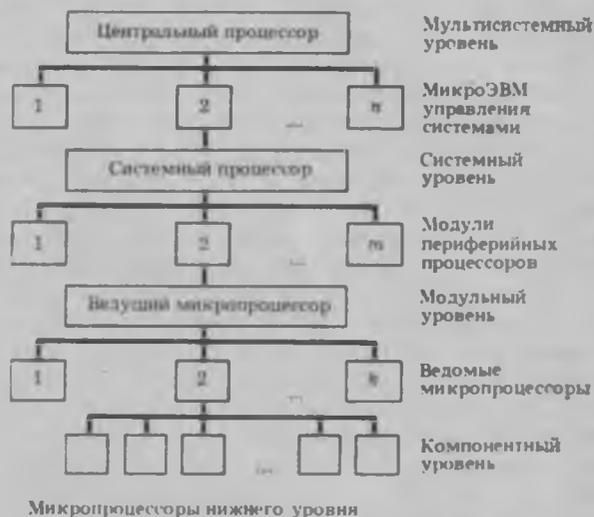
$$\bar{M} = (M \cap \bar{M}) \cup M'.$$

Подбор и доработка известных алгоритмов, а также разработка новых должна производиться в среде системного математического обеспечения, применяемого на ЭВМ данного класса. Последнее накладывает определенные требования по языкам программирования, средствам отображения, возможностям интерактивного взаимодействия. Кроме того, функциональная структура самой системы выдвигает ряд требований по внутренней организации, способам обмена информацией между отдельными уровнями, синхронизации взаимодействия уровней системы во времени. Для АСНИ, являющейся элементом (подсистемой) САИР, методология формирования математического обеспечения является общей. Ей доступны как ППП, так и информационное обеспечение (банк данных).

3.4. Технические средства АСНИ

Обилие поступающей информации с экспериментальных установок и многоплановость ее переработки по алгоритмам различной сложности во многом определяют выбор структуры технических средств АСНИ. Современное состояние развития микропроцессорной техники позволяет ориентироваться на создание многоуровневых многоканальных (децентрализованных) систем научных исследований, позволяющих полностью разделить функции сбора и обработки информации благодаря рассредоточению вычислительных средств по местам обработки, сбора и использования данных. Массивы экспериментальных данных, полученные и обработанные в режиме реального времени на ЭВМ внешнего

Рис. 3.6. Структура технических средств АСНИ



уровня, передаются для решения более сложных вычислительных задач на ЭВМ второго уровня, работающей в режиме разделения времени. Результаты обработки выдаются на лабораторные терминалы пользователя, с помощью которых осуществляется диалог экспериментатора с системой. ЭВМ второго уровня также осуществляет подготовку и формирование записей для передачи на ЭВМ верхнего уровня — в банк данных. Помимо выполнения функций АСНИ, эта ЭВМ может быть ориентирована на решение задач автоматизированного проектирования (рис. 3.6).

Реализация принципа децентрализации на основе использования микропроцессорных средств позволяет строить системы, обладающие высокой гибкостью, возможностью программной переналадки на решение широкого круга задач, простотой модификации и развития, в том числе независимого развития всех составных частей, включая модули программного обеспечения.

Особое место в создании распределенных систем занимают локальные вычислительные сети, объединяющие достижения вычислительной техники, микроэлектроники и техники связи. Главной причиной появления локальных сетей можно считать стремление к обеспечению следующих качеств [12]: создание высокопроизводительных систем путем объединения нескольких микропроцессоров; повышения надежности и живучести системы благодаря сетевой организации обработки данных; сокращения затрат на линии связи и кабельную продукцию, когда источники данных находятся в одном месте, а средства обработки — в другом; интеграции вычислительных ресурсов и более эффективного использования ресурсов наиболее дешевых микропроцессоров и микроЭВМ.

Техника локальных вычислительных сетей создает условия для построения на унифицированной основе нарастаемых многомашинных вычислительных систем с модульной развиваемой и адаптивной структурой, подключением функционально-ориентированных, специализированных, универсальных и высокопроизводительных средств сбора, обработки, хранения и ввода-вывода информации. Создание распределенных вычислительных сетей качественно изменяет процесс переработки информации благодаря наличию таких возможностей, как создание единого центрального или нескольких основных банков данных; обеспечение оперативного обмена информацией с центральным банком данных, со всем ЭВМ сети, обрабатывающими устройствами и подсистемами; использование вычислительных ресурсов всех подключенных к сети ЭВМ для распределенного решения задачи; дублирование вышедших из строя вычислительных средств; одновременная параллельная обработка одной задачи на нескольких ЭВМ и сопоставление результатов обработки для обеспечения высокой надежности решения задачи; доступность технических средств, что снимает необходимость иметь все ресурсы на каждом вычислительном устройстве или в каждой подсистеме; реконфигурация и программная настройка структуры вычислительной сети на тип и класс решаемой задачи; автономизация подсистем или отключение их от сети при выходе из строя [13].

Миниатюризация микропроцессоров, увеличение объема оперативной памяти и быстродействия, совершенствование техники программирования, стандартизация интерфейса — все это создает благоприятные условия для создания АСНИ на базе вычислительных сетей со встроенными микропроцессорами в измерительную, регистрирующую аппаратуру. Последнее особенно важно потому, что исходная информация для АСНИ поступает именно от измерительных устройств и ее достоверность будет определять точность получаемых решений на всех последующих этапах.

На уровне управления экспериментальной установкой возможно применение распространенных в АСУТП регуляторов и систем типа ремиконта — регулятора с микропроцессорной обработкой информации, работающего как программируемое устройство; ГРАСмикро — распределенной микропроцессорной системы; распределенной микропроцессорной системы на базе КТСЛНУС (комплекса технических средств локальных информационных управляющих систем) и ряда других систем.

Устройства ГРАСмикро реализуют функции контроля и управления отдельными агрегатами или участками технологического процесса и komponуются исходя из технологических особенностей объектов управления, их информативной мощности, территориальной рассредоточенности и организационной структуры. Они имеют унифицированную структуру и состоят из микропроцессорной ступени контроля и управления (СКУ); микропро-

цессорной станции реализации локального человекомашинного интерфейса (СЧМИ); системы аппаратных средств (САС) отображения информации и ручного дистанционного управления.

Каждая СКУ устройств ГРАСмикро в распределенной АСУТП обеспечивает возможность реализации широкого круга задач контроля и управления, а именно: ввода от 16 до 80 непрерывных сигналов с группы АЦП интегрирующего типа, перевода в физическую шкалу величин, фильтрации, проверки на достоверность и диагностики АЦП; вывода от 4 до 24 непрерывных сигналов с воспроизведением различных функциональных зависимостей выходного сигнала от входных данных; формирования потенциального регулирующего воздействия по П-, ПИ- и ПИД-закону с безударным включением; ввода от 64 до 384 и вывода от 32 до 324 дискретных сигналов; дискретного регулирования по двухпозиционному закону и дискретное импульсное управление исполнительными механизмами с памятью; программно-логического управления агрегатами и управления их технологическими взаимодействиями.

Поступающая информация обрабатывается микропроцессорным элементом управления по программам, хранящимся в перепрограммируемых запоминающих устройствах (ППЗУ). Промежуточные данные хранятся в оперативном запоминающем устройстве (ОЗУ) и энергонезависимом ОЗУ. С целью повышения надежности и производительности в состав СКУ могут входить два микропроцессорных элемента управления. Обмен информацией и взаимодействие между элементами СКУ производится посредством интерфейсной магистрали.

Человекомашинный интерфейс выполняет функции информации о нарушениях технологического режима, отказах технических средств и действиях оператора. Эти сообщения передаются по каналу связи с помощью соответствующего контроллера в микропроцессорную станцию печати и представления информации (СПИ).

САС предназначена для организации избирательного контроля текущих значений измеряемых параметров и положений исполнительных механизмов, ручного дистанционного управления всеми видами исполнительных механизмов с помощью аппаратно-реализованных модулей управления.

Микропроцессорные комплексы ГРАСмикро могут обмениваться информацией друг с другом и системами более высокого ранга, построенными на базе мини-или микроЭВМ с помощью сетевых контроллеров и протоколов связи.

Внедрение микропроцессорной техники в измерительную аппаратуру приводит к проблеме разработки первичных измерительных преобразователей, специально предназначенных для работы в системе цифрового сбора информации и управления. Наряду с использованием традиционных датчиков все большую актуальность приобретает разработка и внедрение твердотельных первичных преобразователей, предназначенных для непосред-

венной стыковки с микроэлектронными средствами обработки информации. Проблема разработки первичных преобразователей во всем мире признается весьма актуальной, особенно на базе микропроцессоров. Наличие запоминающего устройства в измерительных и регистрирующих устройствах позволяет накапливать информацию и проводить ее первичную обработку непосредственно на месте измерения, учитывать нелинейности первичных преобразователей и тем самым разгружать как каналы связи, так и ЭВМ более высокого уровня.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Ординцев В. М.* Системы автоматизации экспериментальных научных исследований. М.: Машиностроение, 1984. 328 с.
2. *Кафаров В. В., Парахин В. В.* Автоматизация эксперимента в химической технологии // Итоги науки и техники. Процессы и аппараты химической технологии. М.: ВНИИТИ, 1986. Т. 14. С. 3—107.
3. *Кузьмичев Д. А., Радкевич И. А., Смирнов А. Д.* Автоматизация экспериментальных исследований. М.: Наука, 1983. 392 с.
4. *Соминский В. С., Кублиц В. И., Федоров Г. К.* Управление наукой в химической промышленности. М.: Химия, 1978. 236 с.
5. *Ахназарова С. Л., Кафаров В. В.* Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. М.: Высш. шк., 1985. 327 с.
6. *Штраль И. Я.* Определение и классификация автоматизированных систем научных исследований в химической технологии // Автоматизация химических производств. М.: НИИТЭХИМ, 1980. Вып. 1. С. 3—5.
7. Проспект фирмы ARL. SAS—11. Швеция, 1977.
8. *Эляшберг М. Е., Грибов Л. А., Серов В. В.* Молекулярный спектральный анализ и ЭВМ. М.: Наука, 1980. 307 с.
9. *Тимошенко В. И., Штраль И. Я., Лужков Ю. М., Слинько М. Г.* Автоматизированная система для научных исследований в области катализа / Хим. пром-сть. 1979. № 3. С. 172—177.
10. *Круг Г. К.* и др. Принципы построения АСНИ // Автоматизированные системы научных исследований. М.: МЭИ, 1981. Вып. 539. С. 3—26.
11. *Египко В. М., Аракелян В. В., Саркисянц Л. С.* Автоматизация микробиологических экспериментов. Киев: Наук. думка, 1985. 200 с.
12. *Прангшвили И. В.* Микропроцессоры и локальные сети микроЭВМ в распределенных системах управления. М.: Энергоатомиздат, 1985. 272 с.
13. *Якубайтис Э. А.* Информационно-вычислительные сети. М.: Финансы и статистика, 1984. 232 с.

II РАЗРАБОТКА СИСТЕМ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

Глава 4

ОБЩИЕ ВОПРОСЫ ПОСТРОЕНИЯ СИСТЕМ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ

Проблема разработки САПР является сложной, многогранной и трудноформализуемой задачей. И только глубокое понимание проблемы, активное использование знаний о проектируемом объекте, эрудиция и интуиция проектировщика гарантируют высокие качества выходной продукции САПР — проекта. В этом смысле проектирование есть творческий, эволюционный процесс, связанный с большим разнообразием действий, направленных на изобретение новых искусственных объектов для приспособления окружающего мира к некоторым задачам человека, и состоит в проведении комплекса работ, начиная от выявления потребности общества или производства в этом объекте и до разработки технологии его получения [1]. Ранее было показано, что разработка проекта является совокупностью задач, различных по характеру, размерности и степени взаимосвязанности. Однако они успешно решаются в классе специализированного приложения, основываясь на общих принципах стратегии.

4.1. Системный анализ в решении задач проектирования

Отличительной особенностью химических производств как непрерывных процессов является вероятностно-стохастическая природа их протекания. Химическое превращение, тепломассообмен зависят от внутреннего состояния объекта и внешних условий. Поэтому для повышения эффективности производства необходимо обеспечить оптимальные режимы протекания отдельных процессов и благоприятные внешние условия. От того, насколько правильно организовано взаимодействие объекта с внешней средой, будут зависеть потери энергии, массы и в конечном итоге эффективность производства. При интенсивном росте промышленного производства, увеличении единичной мощности возрастание таких потерь уже приводит к заметным экологическим последствиям.

Одним из основных принципов безотходной технологии является снижение до минимума (а в пределе — полное исключение)

взаимодействия химического производства с окружающей средой [1—3]. Это приводит к необходимости комплексной переработки сырья и утилизации побочных материальных и энергетических потоков. Таким образом, химическое производство необходимо рассматривать как многоуровневую кибернетическую систему по переработке энергетических, материальных и иных потоков, т. е. с позиций системного подхода.

Современные вычислительные средства и метод математического моделирования позволили перейти от интуитивной системности исследований к количественному системному анализу химических производств. В соответствии с методологией системного анализа выделяются уровни иерархической структуры рассматриваемой системы начиная с молекулярного и до интегральных оценок с учетом взаимосвязей между отдельными уровнями. Каждый из уровней характеризуется соответствующим математическим описанием. С теоретической точки зрения такой подход позволяет познать явления, начиная с молекулярного уровня, а с практической — получать более адекватное представление о производстве по математическому описанию, выявлять более рациональные способы ведения процесса и решать задачи оптимизации на уровне технологической схемы.

В основе системного анализа лежит декомпозиция сложной системы (явления, химико-технологического процесса и т. д.) на отдельные подсистемы и установление количественных связей между ними. Выделение подсистем (уровней) определяется не только сложностью рассматриваемого объекта, но и степенью изученности данного уровня и наличием математического описания. Рассматривая независимо каждую из подсистем с входными и выходными потоками (энергии, массы, импульса и т. д.) и оценивая потенциал этих потоков, можно выявить источники и стоки, определить допустимые по некоторому критерию потери, а также выявить резервы повышения эффективности отдельных аппаратов и схемы в целом. Например, эксергетический (термодинамический), анализ элементов технологической схемы позволяет не только выявить возможности вторичного использования энергии, но и определить оптимальный энергетический уровень схемы, обеспечивающий минимальные потери энергии в окружающую среду.

Недостаточная изученность отдельных явлений или процессов не позволяет иметь полностью математически формализованное описание объекта. Это определяет зачастую и выделение уровней иерархии, и установление отношений между явлениями. Поэтому до сих пор важным аспектом при реализации системного подхода является использование аналитической информации, экспериментальных данных и наблюдений. Наличие эмпирических и полуэмпирических зависимостей диктует необходимость в таких данных. Методология системного анализа при разработке математической модели процесса приведена на рис. 4.1.

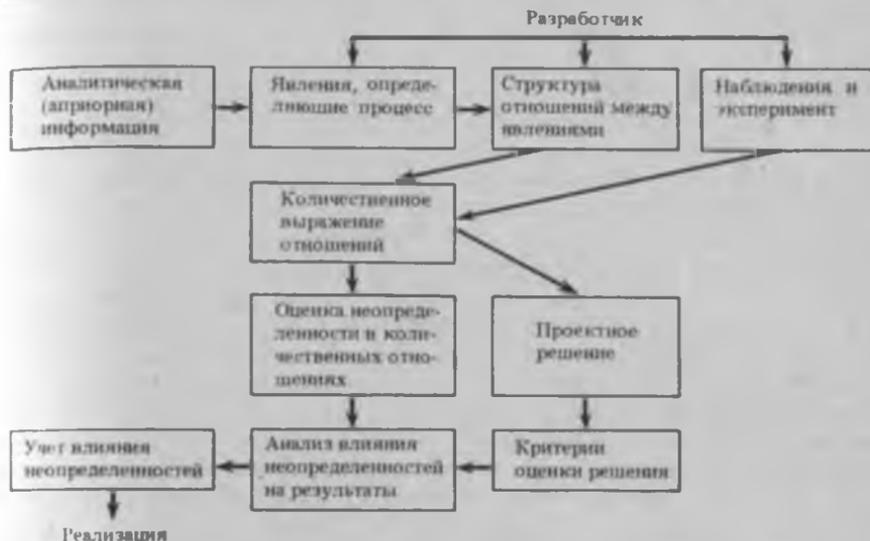


Рис. 4.1. Методология системного анализа при разработке математической модели

Разработка технологической схемы является многоуровневой проблемой и в общем случае может быть сформулирована следующим образом.

На основании вектора выходных переменных (состава и свойств целевых продуктов) Y необходимо определить стратегию получения продуктов и топологию технологической схемы G , а также вектор входных переменных M (состав и свойства исходного сырья), совокупности химических реакций R для получения требуемых продуктов и совокупности способов ведения процесса на отдельных стадиях Q (химическое превращение, разделение и т. д.) при оптимальном значении некоторого критерия эффективности производства:

$$\Psi^* = \underset{G, M, R, Q}{\text{opt}} \Psi(Y, G, M, R, Q), \quad (4.1)$$

Где $G = M \cup P \cup Q$; $M = M(Y, Q, B, P, \varphi)$; $R = P(Y, Q, B, M, \varphi)$; $Q = Q(Y, M, R, B, \varphi)$; B — вектор параметров окружающей среды; φ — предельное значение критерия эффективности производства.

Формально технологическая схема осуществляет функцию преобразования вектора входных переменных целенаправленно в вектор выходных переменных под действием обобщенного технологического оператора T , что функционально можно отобразить в виде

$$Y = T(M, U), \quad (4.2)$$

где $U = \{R, Q\}$ — вектор управляющих переменных.

Обобщенный технологический оператор T является совокупностью простейших операторов, соответствующих различным типам процессов химического производства. К ним следует отнести операторы смешения, деления, изменения энтальпии, изменения давления, химического превращения. Оператор деления может быть двух типов: простой делитель потоков и выделение отдельных чистых веществ (или фракций). На основании физико-химических и технологических свойств процессов при разработке технологической схемы необходимо выбрать для каждого из них соответствующий оператор T . Поскольку основные процессы химической технологии базируются на явлениях переноса массы, энергии, кинетики реакций в условиях относительного движения фаз, определяющих гидродинамическую обстановку в аппарате, то математическое описание технологического оператора будет основываться на законах сохранения массы, энергии и импульса, законах термодинамики многофазных систем, законах тепломассопереноса и т. д. На этапе расчета технологической схемы каждому технологическому оператору необходимо сопоставить адекватный в смысле воспроизведения реальных условий оператор математического описания процесса, такой, что

$$Y' = L_i(M, U). \quad (4.3)$$

Здесь L_i является математическим образом реального оператора. Поскольку математическая модель описывает объект с некоторой неточностью, то и преобразование (4.3) должно обеспечить получение такого Y' , для которого справедливо $Y' \subset Y$. Аналогично и для всего производства $G \subset G$.

Отображение пространства входных переменных M в пространство выходных Y не является единственным, а составляет множество вариантов G реализации технологической схемы:

$$Y' = \{Y = T_i(M, U)\}, \quad i = 1, 2, \dots \quad (4.4)$$

Таким образом, задача разработки технологической схемы заключается в выборе такой схемы

$$g_i \in G, \quad (4.5)$$

которая отвечала бы экстремальному значению критерия (4.1) при выполнении совокупности ограничений типа требований к качеству, энергетике, потерям и т. п.

Создание технологической схемы, оптимальной в смысле некоторого критерия, должно производиться в несколько этапов (рис. 4.2). При известном назначении химического производства, т. е. определенном наборе конечных продуктов и требованиям к ним, можно выделить следующие этапы: выбор исходных реагентов и набора химических реакций, обеспечивающих получение заданных продуктов; выбор способа ведения процесса (реактор вы-

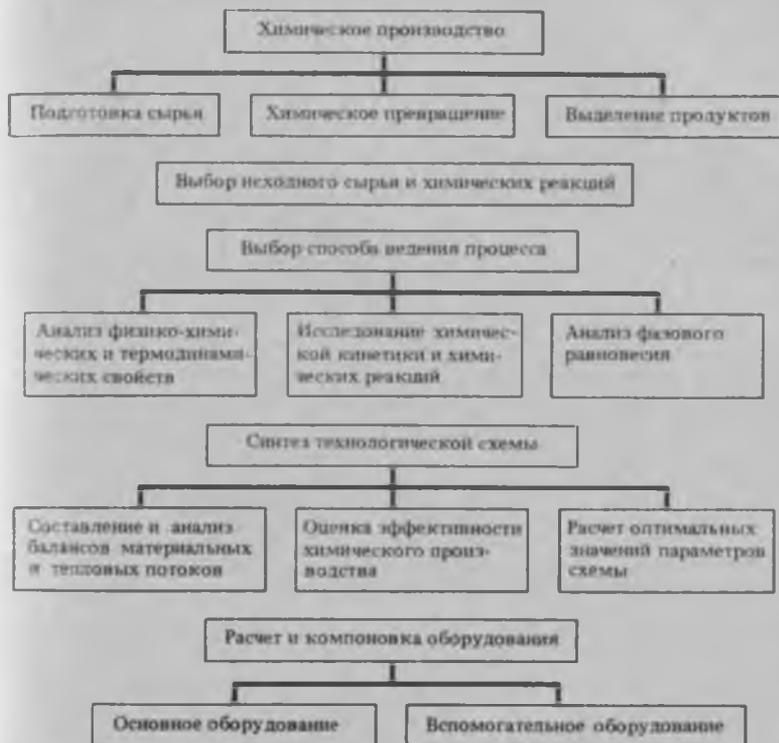


Рис. 4.2. Этапы технологического проектирования химического производства

теснения, каталитический реактор, абсорбция, экстракция и т. д.); выбор (синтез) технологической схемы; выбор оборудования.

Здесь рассматривается собственно технологическое проектирование. Вопросы выбора источников сырья, строительной площадки, размещения оборудования, строительства и т. д. рассмотрены в гл. 1, 2 и 10.

Каждый из этапов является достаточно емким, поскольку связан с выполнением ряда самостоятельных задач. Тем не менее они взаимосвязаны между собой конечной целью. Вероятность получения оптимального варианта схемы зависит от теоретической проработки каждого из этапов. Подготовленность математического обеспечения позволяет на каждом из них выделить ряд подзадач, соответствующих отдельным вопросам исследуемого явления.

4.1.1. Выбор исходных реагентов и набора химических реакций

Решение задач выбора оптимального в некотором смысле маршрута химического превращения, обеспечивающего получение заданных продуктов, в основном проводится экспериментально в лабо-

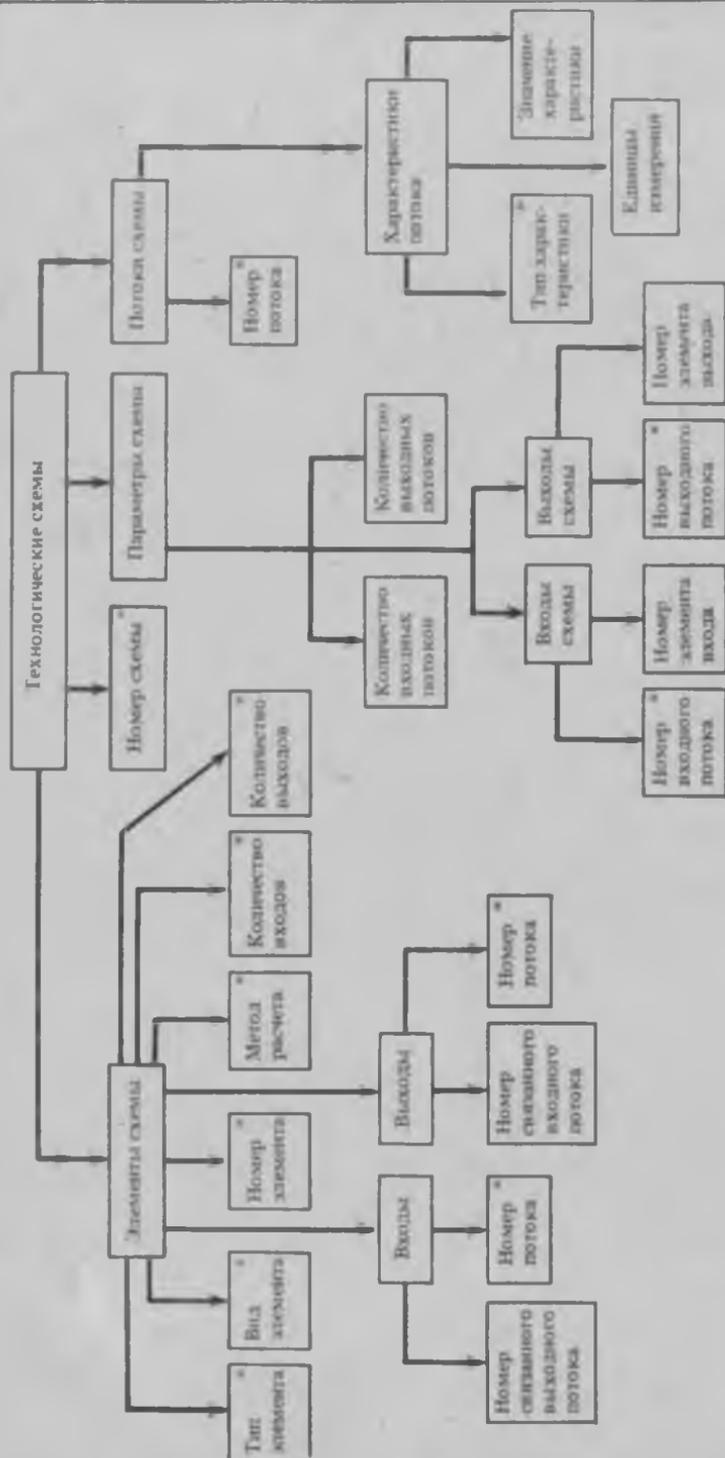


Рис. 5.18. Обобщенная схема базы данных «Технологические схемы»

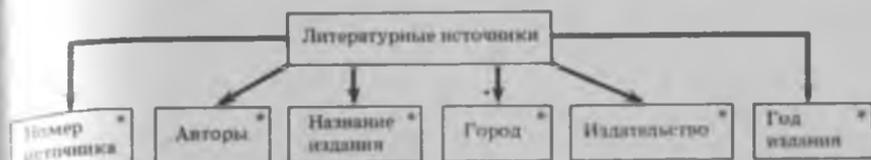


Рис. 5.19. Обобщенная схема базы данных «Литературные источники»

LINE	LEVEL	NAME	FORM	SIZE	Y	%	I	U	T
10	02	NAME1	ASC	50	Y	90	N	Y	Y
20	02	NAME2	ASC	50	Y	90	N	Y	Y
30	02	FORMULA	ASC	20	Y	90	N	Y	Y
40	02	CLASS	ASC	1	Y	90	N	Y	Y
50	01	RG CONSTANT							
60	02	CODE	ASC	3					
70	02	VALUE	ASC	12					
80	02	ERROR	ASC	1					
90	02	VALUEERR	ASC	12					
100	02	LITNUMB	ASC	3					
110	02	LITVOL	ASC	3					
120	02	LITPAGE	ASC	4					

0 ERRORS

Рис. 5.20. Файл базы данных «Физико-химические свойства» (свойства-константы)

Схеме имеется тройной уровень вложенности связей типа «один — многие», реализованный путем введения ключевых полей.

Отображение обобщенной схемы «Физико-химические свойства» реализуется с помощью пяти файлов: три из них содержат свойства чистых веществ (первый — свойства-константы; второй — табличные значения свойств, зависящих от температуры; третий — коэффициенты аппроксимирующих зависимостей свойств, зависящих от температуры) и два — данные по равновесию в бинарных смесях (четвертый — табличные значения равновесных данных;

раторных условиях. Подходы к автоматизированному синтезу требуемых продуктов химического превращения основаны главным образом на использовании известных химических реакций или аналогий с привлечением методов планирования экспериментов для уточнения оценок кинетических параметров моделей. Примерами таких алгоритмов являются топологическая модель в виде двудольного графа химических превращений [4], отражающей информационно-логическую структуру связей между реагентами и химическими реакциями; алгоритм, основанный на концепции изомеризма для простых молекул и совокупностей молекул, что позволяет генерировать точное математическое описание химического превращения [5, 6]; алгоритм, использующий в качестве параметров тип составляющих молекулу атомов и топологическую структуру их связей с другими атомами в молекуле [7, 8]. Этот этап разработки технологической схемы проводится в основном экспериментально с последующей обработкой данных в интерактивном режиме. Отдельные подходы к созданию системы синтеза стадии химического превращения рассмотрены в гл. 8.

4.1.2. Выбор способа ведения процесса

На этом этапе необходимо, по существу, сформулировать задачу многокритериальной оптимизации. Исходной предпосылкой является необходимость получения продукта (основного или промежуточного) с заданными свойствами при условии обеспечения экстремального значения критерия оптимальности. В общей задаче разработки технологической схемы речь идет о раскрытии функционального соотношения (4.3), т. е. выборе наилучшего процесса и типа аппарата.

Выбор процесса среди возможных заключается в анализе условий его реализуемости на основе некоторого критерия, например минимума приведенных затрат. Прежде всего необходимо решить вопрос о принципиальной возможности промышленной реализации данного способа. Решение его возможно как экспериментальным, так и расчетным путем. Естественно, предпочтение следует отдать расчетному методу как наиболее дешевому и быстрому. Это не исключает, однако, проведение экспериментальных исследований, но позволяет свести их к минимуму.

Проведение расчетного исследования возможно лишь при наличии достоверных физико-химических, термодинамических, равновесных данных смеси, а также данных о возможности технической реализации процесса. Уже сами свойства смеси позволяют сделать предварительную оценку реализуемости процесса данным или группой способов. Так, при разделении продуктов наличие пеконденсирующихся компонентов в смеси предполагает использование абсорбции или какого-либо другого способа разделения газовых смесей. Проведение расчетов отдельных единиц оборудова-

ния позволяет сделать вывод о практической реализуемости конкретного способа и определить конкурирующие. Естественно, при этом необходимо учитывать требования на качество продуктов, равно как и сведения о предшествующих и последующих стадиях производства.

Уже на стадии выбора отдельных способов ведения процесса необходимо решать системные вопросы. Это означает, что проектирование отдельного аппарата не является самоцелью, а должно проводиться с учетом возможности исключения потерь массы и энергии. Чаще всего критерий оптимальности технологической схемы не является аддитивной функцией критериев отдельных ее элементов, а представляет собой сложную функцию параметров отдельных процессов и параметров, характеризующих взаимодействие между ними в пределах технологической схемы и с окружающей средой. Это связано прежде всего с утилизацией материальных и энергетических потоков.

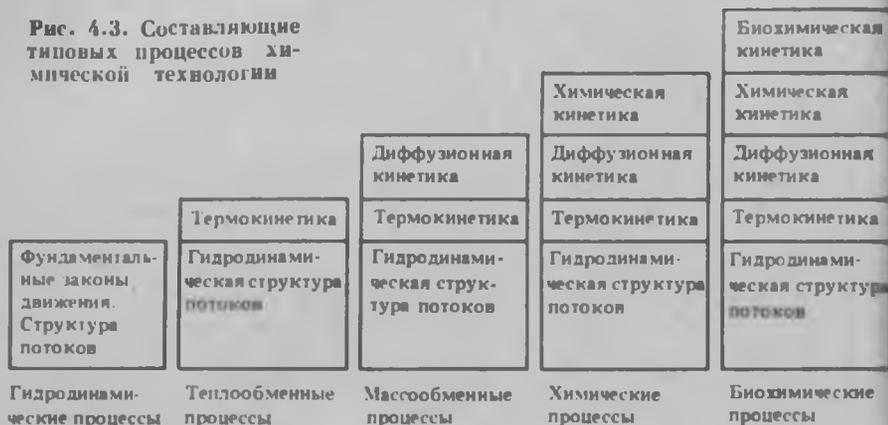
В соответствии со стратегией системного анализа оптимизирующие переменные технологической схемы удобно разделить на две группы — локальные и системные (или глобальные). Оптимальные значения системных параметров будут определять оптимальные условия эксплуатации всего производства, но не обязательно отдельных элементов. Например, при вторичном использовании тепла верхнего продукта ректификационной колонны в качестве источника энергии для подогрева кубового продукта (при наличии необходимой разности температур) флегмовое число может превышать оптимальное для данной колонны, поскольку помимо разности температур поток должен обладать соответствующей тепловой мощностью.

К локальным переменным следует отнести параметры, характеризующие условия работы отдельного аппарата, например скорость парового потока, число тарелок или высоту насадки. Эти параметры при фиксированных значениях системных полностью характеризуют оптимальный режим работы аппарата, однако при изменении последних их значения будут также изменяться.

Системные параметры составляют критерий оптимальности технологической схемы и включают помимо отдельных характеристик аппаратов обобщенные параметры схемы. При проектировании отдельных аппаратов или установок значения этих параметров или их составляющих являются ограничениями типа неравенств. На основании критерия оптимальности, включающего системные параметры, производится окончательный выбор способа выделения отдельных продуктов из группы альтернативных по локальным характеристикам способов.

Обоснованный выбор способа ведения процесса (группы альтернативных процессов) должен проводиться с учетом ряда факторов, а именно в результате анализа физико-химических, термодинамических свойств смеси и отдельных компонентов; исследо-

Рис. 4.3. Составляющие типовых процессов химической технологии



вания условий химического и фазового равновесия; эксергетического (термодинамического) анализа отдельных установок; оценки стоимостных характеристик установок.

Химическое производство представляет собой иерархическую структуру по горизонтали: подготовка сырья, химическое превращение и выделение продуктов. Каждая из стадий может содержать произвольное количество разнородных процессов, отличающихся природой определяющих явлений, а именно: а) гидродинамические процессы: перемещение жидкостей и газов в аппаратах и трубопроводах; получение и разделение неоднородных систем газ—жидкость (туманы), газ—твердое вещество (пыли), жидкость—твердое вещество (суспензии), жидкость—жидкость (эмульсии); б) тепловые процессы: кипение, испарение и конденсацию, выпаривание; в) диффузионные процессы: экстракцию, абсорбцию, адсорбцию, кристаллизацию, мембранные, ректификацию и т. д.; г) химические процессы: химические превращения в реакторах; д) биохимические процессы: биохимические превращения в реакторах, аэротенках и т. д.; е) механические процессы: измельчение твердых веществ и их транспортирование, сепарирование сыпучих веществ и т. д. [1].

Исходя из блочной структуры модели, типовые процессы химического производства можно представить в виде отдельных составляющих, как это показано на рис. 4.3. В зависимости от назначения отдельных моделей эти составляющие будут иметь описание различной степени детализации. Например, при описании диффузионного процесса гидродинамика перемещения потока в трубопроводах подвода сырья и отвода продуктов может на стадии оценки явлений массотеплопереноса не учитываться, а выступать определяющим фактором при гидравлическом расчете трубопроводов.

Отдельные стадии химического производства содержат обычно различные типовые процессы, объединяемые назначением. Например, стадия химического превращения содержит реакторы различного типа, стадия выделения — различные массообменные (преимущественно) процессы, стадия подготовки сырья — обычно наиболее разнородную группу типовых процессов в зависимости от агрегатного состояния и степени подготовленности сырья. Это могут быть и массообменные процессы (абсорбция, адсорбция) для очистки от нежелательных сопутствующих газовых примесей, гидродинамические процессы для разделения неоднородных гетерофазных систем, механические процессы и т. д. Поэтому в дальнейшем будет рассматриваться не эта группа процессов отдельно, а лишь составляющие ее способы в стадиях химического превращения и выделения продуктов химических реакций.

Химические превращения. При решении задач проектирования химических реакторов необходимо рассматривать последние на микро- и макроуровнях. На макроуровне определяются закономерности протекания химических превращений при воздействии на них процессов переноса массы, тепла, импульса, т. е. решается вопрос о выборе наилучшего типа промышленного реактора и определения его конструктивных и рабочих условий.

Исследования на микроуровне проводятся для всех типов реакторов. Они заключаются в определении механизма протекания химических реакций и построении кинетических моделей. Для этого необходимо выполнить следующее [9].

А. С использованием принципов стехиометрического анализа по априорной (логической, качественной и количественной) информации методами общей алгебры осуществить синтез возможных механизмов химической реакции. При расчете возможных механизмов реакции на ЭВМ учитывается качественный и количественный состав реагирующих молекул, а также их геометрическая конфигурация и оптические свойства. На основе качественной теории дифференциальных уравнений прогнозируются динамические свойства химического процесса и определяются необходимые условия наличия или отсутствия у химических систем колебательных динамических режимов или множественности стационарных состояний.

Б. Для непротиворечивой априорной информации о механизмах и кинетических моделях провести построение стандартного плана эксперимента. По его результатам оценить константы конкурирующих кинетических моделей.

В. Обычно стартовые оценки констант получаются с неудовлетворительной точностью, поэтому требуется проведение уточняющего эксперимента (последовательно планируемого). В зависимости от дисперсионной матрицы оценок выбирается критерий оптимальности уточняющего плана. Обычно в качестве критерия используют А-, Д-, Е-критерии или их линейные или нелинейные

комбинации. Необходимо также осуществить проверку адекватности моделей по определенным статистикам и при необходимости выполнить направленную их коррекцию (после установления причин возможной неадекватности в результате выполнения дисперсионного анализа моделей).

Г. Для многооткликowych ситуаций осуществить последовательное планирование дискриминирующих экспериментов и дискриминацию моделей статистическими методами, не предусматривающими предварительной линеаризации моделей. Основными методами дискриминации являются энтропийный и последовательного отношения вероятностей.

Если исследования на микроуровне являются достаточно общим подходом не только при анализе реакторных процессов, то задачи, решаемые на макроуровне, различаются в зависимости от типа реактора.

Химические реакторы принято классифицировать по фазовому признаку реагирующих систем на гомогенные и гетерогенные, а по способу организации — на непрерывные, полунепрерывные, периодические и циклические [10].

Гомогенные реакции протекают в одной фазе — жидкой или газовой (соответственно реакторы жидкофазные и газофазные), и не сопровождаются фазовыми переходами. При их расчете основное внимание уделяется учету неравномерности распределения тепла и массы (поперечных и продольных градиентов), конвективного переноса (диффузии) и теплопроводности на селективность и производительность реактора [11].

Гетерогенные реакции сопровождаются транспортными явлениями внутри фаз и между ними. Это реакции в системах газ—жидкость, жидкость—жидкость, газ—твердое тело, жидкость—твердое тело, газ—жидкость—твердое тело (катализатор), причем они могут протекать в сплошной, дисперсной фазе или одновременно в обеих фазах. Совокупность факторов, которые необходимо учитывать при проектировании гетерогенных реакторов, весьма обширна и разнообразна в зависимости от фазового состояния реагентов и продуктов реакции, их аппаратного оформления. Поскольку химическому превращению предшествует стадия транспортирования вещества из фазы в зону реакции и отвод продуктов реакции, скорость протекания собственно химического взаимодействия будет определяться соотношением скоростей химического превращения и массопереноса, и в зависимости от превалирования одной из составляющих она будет протекать или в диффузионной, или в кинетической области. Отсюда следует важность обеспечения необходимых условий массопереноса за счет гидродинамических факторов, т. е. состояния фаз, а также за счет агрегатного состояния реагентов (например, распределения частиц по размерам в случае реакций с твердой фазой).

Гомогенные реакторы. Конструктивно гомогенные реакторы

выполняются в виде аппаратов с мешалками или трубчатых (проточных) аппаратов. При известной кинетике и механизме реакций выбор типа реактора определяется условиями обеспечения равномерности распределения реагентов в объеме. Наличие градиентов концентрации, температуры приводит к изменению физико-химических свойств реагентов (вязкости, плотности и т. д.) и, как следствие, к искажению профиля скоростей, неравномерному протеканию реакции по объему или сечению реактора. В случае изотермических реакций изменение характеристик реагентов в ходе протекания реакции может привести к неустойчивости системы в целом, т. е. к нарушению установившегося состояния по скоростям теплоприхода и теплоотвода. Характерными вопросами, решаемыми при проектировании этих реакторов, является оценка гидродинамической структуры потоков, обеспечение необходимого температурного режима реактора.

Гетерогенные реакторы. Реакторы для проведения двухфазных (газ—жидкость, газ—твердое вещество, жидкость—твердое вещество) и трехфазных (газ—жидкость—твердое вещество) реакций конструктивно отличаются большим многообразием. Это реакторы емкостного типа с перемешивающими и диспергирующими устройствами; трубчатые реакторы полые или с насадкой, с рубашкой и т. д.; колонные реакторы барботажные полые или с насадкой, секционированные, полочные, с кипящим слоем (катализатора) и др.

Исследование реакторов для систем газ—жидкость с целью их расчета и проектирования ведется в следующих направлениях [10]: изучение механизма и скорости процесса массопередачи, осложненного химической реакцией; моделирование структуры потоков двухфазной системы; оценка влияния продольного перемешивания на эффективность реакторов; определение межфазной поверхности, удерживающей способности, перепада давления. Важным вопросом является выбор типа реактора. Сравнение коэффициентов массоотдачи по жидкой фазе для систем газ—жидкость в различных реакторах приведено в табл. 4.1 [10].

Таблица 4.1

Тип реактора	$k_L \cdot 10^4$, м/с	Тип реактора	$k_L \cdot 10^4$, м/с
Ячейки перемешивания	0,2—1	Барботажная колонна с колпачковыми тарелками	3—4
Прямоточный трубчатый реактор	5—15	Насадочная противоточная колонна	0,5—2
Циклонный реактор	10—40	Насадочная прямоточная колонна	1—5
Реактор с мешалкой	1—4		
Барботажная колонна	1—4		

При расчете реакторов для систем газ—твердое вещество (частицы) основными задачами при моделировании являются оценка гидродинамической структуры фаз, определение удельной поверхности реакции, оценка изменения состояния твердых частиц в ходе реакции, определение соотношения скоростей процессов тепло- и массопереноса.

Расчет реакторов с твердым катализатором проводится в несколько этапов. Во-первых, устанавливаются модели пористой структуры зерна катализатора, кинетики адсорбции и модель зерна катализатора в целом. Идентификация моделей структуры зерна и адсорбции реагентов проводится вариационными методами по кривым отклика на последовательно планируемые возмущения индикатором. Эти методы используют в своей основе статистические процедуры проверки гипотез. Объединение моделей пористой структуры, кинетической и адсорбционной позволяет построить модель зерна, по которой на основе конечно-разностных или колокационных методов вычисляются длительности установления стационарных состояний и их возможное число, определяется характер формирования отдельных стационарных состояний и их устойчивость.

Во-вторых, методами непрерывной параметрической идентификации, основанными на алгоритмах оптимальной фильтрации, строятся гидродинамическая модель, модели тепло- и массопереноса по последовательно планируемому непрерывным и дискретным наблюдениям. Указанные модели, дополненные моделью зерна, позволяют установить общую модель реактора, а также ее стохастические свойства и свойства параметров. Эта модель испытывается на точность прогнозирования динамических и статических режимов работы реактора. Для этой цели моделируются в соответствии со статическими свойствами параметров модели их случайные реализации и рассчитываются случайные реализации концентрационных и температурных полей в реакторе. Совокупности полученных реализаций позволяют построить гистограммы величин откликов системы, которые характеризуют прогнозирующие свойства модели в интервале изменения технологических параметров процесса. В заключение выполняется расчет конструкционного оформления реакторного узла и оптимальных режимов его эксплуатации.

Итак, при выборе способа реализации реакторного процесса необходимы экспериментальные данные как на стадии выявления механизма реакции, так и при непосредственном расчете промышленного реактора. Поэтому математические модели реакторов содержат большое число параметров, определяемых по опытным данным.

Выделение целевых продуктов. Основой выбора эффективного способа разделения продуктов реакции является физико-химическая природа явлений, определяющих процесс. Благодаря после-

довательному углублению знаний о процессах постоянно вскрываются неиспользуемые возможности отдельных способов разделения, появляются более совершенные его модификации.

Альтернативными способами выделения чистых продуктов или фракций обычно являются ректификация, экстракция, адсорбция, кристаллизация, мембранные процессы, абсорбция, выпаривание. В последнее время стало уделяться значительно больше внимания другим, помимо ректификации, способам разделения в силу нескольких причин. Во-первых, вследствие высокой энергоемкости ректификации и роста цен на источники энергии. Так, в США за 1976 г. на ректификацию было израсходовано $2,11 \cdot 10^{15}$ КДж или 3% всех энергетических затрат страны [12]. Во-вторых, по мере совершенствования технологии эти процессы становятся дешевле. В значительной степени этому способствует и совершенствование систем управления.

Обычно вопрос о замене ректификации другим способом возникает в тех случаях, когда применение ее либо вообще невозможно, либо сопряжено со значительными дополнительными затратами. Например, обычная ректификация не позволяет выделить компоненты, входящие в азеотропную смесь. Нужно либо изменить давление в системе и тем самым сдвинуть азеотроп, либо применить азеотропную или экстрактивную ректификацию, подобрав соответствующий разделяющий агент.

Применение другого способа разделения тогда может быть экономически выгодно, когда свойства смеси соответствуют физической основе данного способа. Так, при наличии расслаивания естественным способом первичного разделения является декантация, способность же вещества кристаллизоваться в определенных условиях предполагает применение кристаллизации. Если же физические условия процесса необходимо подбирать искусственно (подбор экстрагента, растворителя и т. д.), то помимо затрат на проведение непосредственно процесса добавляются затраты на регенерацию носителя (экстрагента, растворителя и т. д.).

Создание физических условий процесса обычно сопряжено со значительными расчетными и экспериментальными исследованиями, так как необходимо выполнить ряд физических и технологических требований с целью выбора наилучшего варианта технологического и аппаратурного оформления. По существу, речь идет об искусственном создании смеси с заданными свойствами. Это относится к таким процессам, как азеотропная или экстрактивная ректификация, экстракция, кристаллизация.

Мембранные процессы. Все большую роль при разделении смесей (особенно газовых) в промышленности приобретают мембранные процессы. При разделении газовых смесей по общему объему капитальных и эксплуатационных затрат они уже превосходят другие способы, правда, при значительно более низкой производительности.

Применение мембран особенно удобно для разделения азеотропных смесей. В этой связи все больший интерес проявляется к разделению испарением жидкости на поверхности мембраны. Трудность состоит в обеспечении подвода большого количества тепла к поверхности мембраны для испарения жидкости. Альтернативой этому методу является разделение предварительно испаренной жидкости. Но промышленного значения эти способы в химической технологии пока не получили [13].

Разделение смесей (например, газовых) с помощью мембран основано на их способности проникать через материал мембраны с различной скоростью вследствие различия подвижностей или растворимостей. Для целей промышленного применения мембрана должна обладать соответствующей эффективностью разделения (фактором разделения или эффективностью). Типичные смеси, которые могут быть разделены известными мембранами (на основе ацетатцеллюлозы или полисульфонных) в настоящее время и в ближайшем будущем, приведены в табл. 4.2 [13].

Таблица 4.2

Существующие технологические процессы		Перспективные технологические процессы	
H_2/C_1^+	H_2S/C_1^+	H_2/CO_2	NH_3/N_2
H_2/CO	CO_2/C_1^+	H_2S/CO_2	SO_2/C_1^+
He/C_1^+	CO_2/CO	NH_3/H_2	SO_2/CO_2
$H_2O_{(n)}/C_1^+$	CO_2/N_2	NH_3/C_1^+	NO_x/C_1^+
NO_x/N_2	O_2/N_2	N_2/C_1^+	Пары органических соединений
NO_x/CO	$CO_2/Воздух$	C_1/C_2^+	

Недостаточная изученность явлений переноса через мембрану и трудность подбора материала мембраны (пока он ведется в большей степени экспериментально) являются основными сдерживающими факторами интенсивного внедрения этого способа разделения. Кроме того, сильная зависимость долговечности мембран от механических нагрузок, температуры, примесей в значительной степени ограничивает область их применения. Это особенно относится к разделению жидких смесей, где труднее обеспечить однородность потока.

Вопрос о механизме переноса газового потока через мембрану до сих пор является дискуссионным, и существующие подходы к моделированию процесса основываются на явлениях растворимости и диффузии. По существу, математическое описание явлений переноса основывается на уравнениях диффузии (закон Фика) и растворимости (закон Генри). Закон Фика позволяет определить

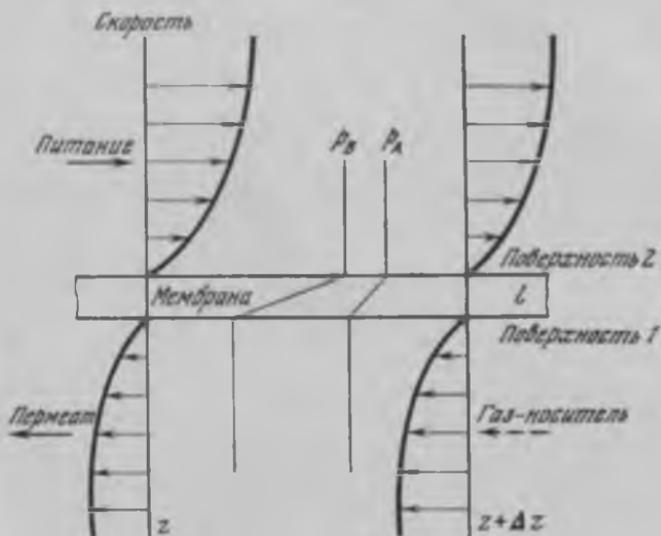


Рис. 4.4. Структура потоков в противоточном мембранном элементе

диффузионный поток компонента в зависимости от градиента концентрации [14]:

$$g_i/A = D_i(x_{i2} - x_{i1})/l, \quad (4.6)$$

где g_i — переносимый через мембрану поток компонента i ; A — площадь поверхности мембраны; D_i — коэффициент диффузии компонента i ; l — толщина мембраны; x_{i1} , x_{i2} — концентрации компонента i у соответствующих поверхностей мембраны. Закон Генри устанавливает связь между концентрациями компонентов в фазе полимера и парциальными давлениями компонентов у поверхности мембраны:

$$x_i = S_i p_i, \quad (4.7)$$

где S_i — константа растворимости компонента i ; p_i — парциальное давление компонента i в газовой фазе. Подставляя уравнение (4.7) в (4.6), можно записать

$$g_i/A = P_i(p_{i2} - p_{i1})/l, \quad (4.8)$$

где $P_i = D_i S_i$ — проницаемость компонента i ; p_{i2} и p_{i1} — парциальные давления компонента i со стороны высокого и низкого давлений. Аналогичные уравнения могут быть записаны по каждому из компонентов разделяемой смеси. На рис. 4.4 приведены профили концентраций при разделении двухкомпонентной смеси.

Фактор разделения или коэффициент относительной проницаемости определяется как

$$\alpha_{ij} = P_i/P_j \quad (4.9)$$

и характеризует способность мембраны разделять компоненты i и j , т. е. концентрировать газовую смесь.

По мере прохождения газовой смеси вдоль мембраны более подвижный компонент удаляется (проникает через мембрану), а менее подвижный концентрируется в остатке. Таким образом, парциальное давление уменьшается для более подвижного компонента и увеличивается для менее подвижного и, следовательно, уравнение (4.8) справедливо для каждой точки вдоль потока

$$Q_i = \int dg_i = \int \frac{P_i}{l} (p_{i2} - p_{i1}) dA_i \quad (4.10)$$

где Q — общий мольный поток компонента i . Из этого уравнения следует, что условия работы мембраны меняются непрерывно вдоль поверхности и что степень извлечения компонента зависит от проницаемости, разности парциальных давлений и толщины мембраны. Проницаемость является прямой характеристикой мембраны, в то время как разность парциальных давлений и толщина мембраны зависят от свойств мембранного полимера.

Растворимость и диффузия газов зависят от свойств полимеров и разделяемых газов. Поскольку проницаемость является функцией растворимости и диффузии, то факторы, влияющие на последние, оказывают влияние и на проницаемость. В частности, проницаемость является функцией температуры и эта зависимость выражается следующим образом:

$$P_i(T) = K_i \exp(-E_i/RT), \quad (4.11)$$

где K_i и E_i — параметры, обычно определяемые экспериментально для каждого типа полимера. Из уравнений (4.9) и (4.11) следует, что

$$\alpha_{ij}(T) = (K_i/K_j) \exp(-(E_i - E_j)/RT), \quad (4.12)$$

т. е. фактор разделения также является функцией температуры.

При моделировании мембранных процессов разделения необходимо также учитывать взаимодействие различных компонентов смеси между собой. Это особенно важно для полярных газов, когда растворимость одного из них в полимере может влиять на растворимость другого. Аналогично накопление отдельных растворителей в полимере пластифицирует последний и тем самым может оказывать влияние на проницаемость.

Представленные уравнения характеризуют перенос компонента через единичную поверхность мембраны. Для расчета мембранного элемента они должны быть дополнены уравнениями матери-

ального баланса вида

$$WY_i|_z - WY_i|_{z+\Delta z} = q_i\Delta A; \quad (4.13)$$

$$W|_z - W|_{z+\Delta z} = \sum q_i\Delta A, \quad (4.14)$$

где q_i — мольный поток компонента i ; Y_i — локальный состав компонента i ; W — переносимый поток газа.

Парциальное давление компонента связано с составом следующим образом:

$$p_i = Y_i p_T, \quad (4.15)$$

где p_T — общее давление.

В идеальном случае предполагается равномерное распределение скоростей и давлений вдоль мембраны. Однако на практике в зависимости от расходов и давлений такое предположение чаще всего является достаточно грубым приближением, и необходимо учитывать реальное распределение параметров. Поэтому полное математическое описание мембранного процесса разделения должно учитывать, по крайней мере, кинетику массопереноса через мембрану с учетом взаимовлияния отдельных компонентов, гидродинамику потоков (профиль скоростей и давлений) со стороны высокого и низкого давлений, условия равновесия фаз (соотношение компонентов между полостями высокого и низкого давлений), геометрию разделительных элементов (плоские или цилиндрические мембраны.).

Кристаллизация. В последнее время все большее значение в химической технологии для разделения компонентов приобретает кристаллизация из-за меньшей энергоемкости по сравнению с ректификацией, так как теплота кристаллизации обычно намного меньше теплоты испарения; многоступенчатые кристаллизаторы вследствие повышения точности проектирования, степени автоматизации и совершенствования оборудования, обеспечивающие получение чистых компонентов разделяемой смеси [15].

Это привело к интенсификации исследований в области кристаллизации, поскольку без знания условий образования кристаллов (их чистоты, выхода), без надлежащего выбора растворителя невозможна реализация процесса.

Применение кристаллизации ограничено прежде всего веществами, обладающими кристаллической структурой в твердом виде. При проектировании кристаллизатора важно знать, образуется ли смесь кристаллов и смешанные кристаллы, а также сведения о наличии эвтектики. Разделение становится трудным или вообще невозможным, если происходит неограниченное образование смешанных кристаллов.

Наличие эвтектической точки в принципе позволяет разделить смесь компонентов в одноступенчатом кристаллизаторе, однако выход и состав продукта будут ограничены параметрами эвтектиче-

ской смеси. Исследования условий образования эвтектики и свойств смеси при изменении давления позволили предложить комбинированный метод кристаллизации, основанный на том, что при давлении ниже давления в четверной точке равновесные составы фаз определяются только равновесием между твердой фазой и паром (жидкая фаза отсутствует) [16]. Поэтому различие скоростей конденсации компонентов позволяет путем подбора соответствующей температуры выделить практически чистый компонент. С этой целью смесь эвтектического состава подается в кристаллизатор плавления, через который проходит с постоянной скоростью газ-носитель. С выхода газ-носитель с парами смеси поступает в конденсатор, где происходит конденсация в соответствии с условиями фазового равновесия. Для смеси нафталин—дихлорбензол таким путем удалось получить дихлорбензол концентрацией 99% на лабораторной установке (в эвтектической точке содержание дихлорбензола 60,8%).

Одним из основных вопросов, решаемых при расчете кристаллизаторов, является описание кинетики кристаллизации, состоящей из стадий создания пересыщения, образований зародышей и роста кристаллов. Она также зависит от перекристаллизации осадка, коалесценции и дробления кристаллов в результате столкновения между собой и со стенками аппарата. На кинетику массовой кристаллизации существенно влияют температура, степень пересыщения раствора, перемешивание, наличие примесей, физико-химические свойства раствора, конструкция аппарата и т. д. Детальное описание явлений и факторов, сопровождающих процессы массовой кристаллизации из растворов и газовых смесей, дано в монографии [17]. Важное значение имеет также описание условий равновесия между сосуществующими фазами (твердое вещество—жидкость, твердое вещество—газ (пар)). На основании условий фазового равновесия в первом приближении возможен выбор необходимого растворителя для процессов кристаллизации, а также перекристаллизации.

Таким образом, математическое описание процесса кристаллизации необходимыми элементами должно содержать описание явлений кинетики кристаллизации (кинетики массопереноса), гидродинамики фаз, фазового равновесия.

Комплексы с разделяющими агентами. Эта группа массообменных процессов относится к специальным способам разделения и обычно аппаратуру состоит из собственно узла разделения и узла регенерации разделяющего агента. По сравнению с обычной ректификацией эти комплексы целесообразно применять в тех случаях, когда разделяемая смесь близкотикиющая или содержит азеотропы (как гомогенные, так и гетерогенные), а также если температура верхнего продукта очень мала или температура низа очень высока для обычной ректификации. Так, например, если коэффициенты относительной летучести близки к единице, то целесооб-

разно применить процесс экстрактивной ректификации, а при низкой температуре верхнего продукта — процесс абсорбции.

К комплексам с разделяющими агентами можно отнести: а) азеотропную ректификацию, когда один или несколько компонентов исходной смеси образуют с разделяющим агентом азеотропные смеси, отбираемые в виде дистиллята; б) экстрактивную ректификацию, когда высококипящий разделяющий агент, изменяя соотношение относительных летучестей компонентов исходной смеси, отводится с кубовым продуктом; в) азеотропно-экстрактивную ректификацию, когда высококипящий разделяющий агент образует азеотроп и часть его отбирается в виде азеотропной смеси в качестве дистиллята, а другая часть — в виде кубового продукта; г) гетероазеотропную ректификацию, когда разделяющий агент образует с одним или несколькими компонентами исходной смеси гетероазеотроп, отбираемый в виде дистиллята; после расслаивания разделяющий агент возвращается в технологический цикл; д) экстракцию, когда один или несколько компонентов исходной смеси селективно растворяются в частично смешивающемся разделяющем агенте, способствуя тем самым выделению последних; е) абсорбцию, десорбцию, когда пары одного или нескольких компонентов растворяются в разделяющем агенте, тем самым способствуя выделению необходимых веществ; ж) адсорбцию, когда отдельные компоненты исходной смеси адсорбируются на поверхности твердого носителя.

Проблема использования комплексов с разделяющими агентами состоит не столько в проведении самого процесса разделения, сколько в подборе такого носителя, который бы отвечал необходимым требованиям. Носитель должен обладать прежде всего следующими свойствами: изменять коэффициенты относительной летучести смеси (отдельных компонентов) в нужном направлении (обладать достаточно высокой поглотительной способностью и селективностью — в случае абсорбции, обладать необходимой зоной расслаивания и селективной растворимостью — в случае экстракции); легко регенерироваться из смесей с компонентами разделяемой системы; быть безопасным в обращении, доступным и дешевым; быть устойчивым (к разложению, осмолению и т. д.), инертным по отношению к компонентам разделяемой смеси, не оказывать коррозионного воздействия на аппаратуру.

Отсюда следует, что предъявляемые к носителям требования связаны с обеспечением условий фазового равновесия, селективности, с отсутствием побочных эффектов в процессе разделения. Аналогичные требования предъявляются к процессу адсорбции. Важно иметь в виду, что применение этих способов обычно предполагает дополнительную стадию — стадию регенерации носителя. В случае ректификации (азеотропно-экстрактивной, экстрактивной, азеотропной) и экстракции это декантация или обычная ректификация, а в случае абсорбции и адсорбции — десорбция. По-

этому к затратам на реализацию процесса добавляются расходы на носитель и его регенерацию.

Совмещенные процессы. Под совмещенными процессами понимают такие, когда два или более процессов протекают одновременно и в одном аппарате с эффективностью на уровне или выше, чем раздельно. К таким процессам можно отнести, например, совмещение химической реакции и ректификации (хеморектификацию), химической реакции и абсорбции (хемосорбцию), т. е. совмещение стадий химического превращения и разделения, а также совмещение процессов одного типа, например ректификации и экстракции и т. д. Эффективность совмещенных процессов следует рассматривать в двух аспектах. Во-первых, снижаются капитальные затраты за счет уменьшения числа единиц оборудования, во-вторых, снижаются эксплуатационные затраты за счет снижения и энергетического объединения материальных потоков. Негативная сторона такого совмещения заключается в более жестких условиях эксплуатации и соответственно в более четком ведении процесса.

Целенаправленное совмещение ректификации и химической реакции особенно эффективно в тех случаях, когда реакция протекает с высокой скоростью и большим тепловым эффектом и их совместное протекание не противоречиво. В этом случае основная цель совмещения состоит в активном использовании тепла химической реакции непосредственно в одном аппарате без промежуточных преобразователей и, следовательно, с высокой эффективностью. В отличие от обычно применяемой рекуперации тепла реакции в случае совмещения должна уменьшиться инерционность объекта и соответственно возрасти область устойчивых режимов. Другой причиной совмещения может служить потребность в изменении топологии концентрационного симплекса составов при разделении азеотропных смесей.

Совмещение абсорбции и химической реакции, как правило, способствует более полному извлечению компонента вследствие снижения величины равновесного давления над раствором.

Совмещение ректификации и экстракции (азеотропно-экстрактивная ректификация) позволяет снизить энергозатраты на ведение процесса разделения за счет перераспределения потоков внутри колонны. Правда, как уже отмечалось, при искусственном создании расслаивающихся смесей применение метода сопряжено с подбором разделяющего агента и последующей его регенерацией.

Итак, математическое описание комплексов с разделяющими агентами и совмещенных процессов помимо традиционных элементов для массообменных процессов должно содержать соответственно алгоритмы выбора разделяющих агентов и расчета стадий химического превращения.

Выпаривание. Этот способ разделения (концентрирования) находит широкое распространение в технологии неорганических

веществ, пищевой промышленности и состоит в отделении летучих компонентов (чаще всего воды) от высококипящих остатков в аппаратах барботажного типа. Выпаривание — достаточно энергоемкий процесс. Для снижения энергозатрат обычно организуются многоступенчатые технологические установки, работающие под различным давлением с целью использования вторичного парового потока. Математическое описание такого процесса должно содержать все элементы, свойственные массообменным процессам: кинетику массопереноса, гидродинамику потоков, фазовое равновесие, а также алгоритмы решения системных вопросов, связанных с рациональным выбором давлений в отдельных аппаратах и перераспределением потоков продукта и вторичного пара.

В табл. 4.3 приведено сравнительное сопоставление способов разделения [18].

Таблица 4.3

Процесс	Достоинства	Недостатки	Область применения
Ректификация	Простота организации, надежность. Контроль качества. Легкость масштабного перехода. Относительно низкие капитальные затраты	Энергоемкость. Могут потребоваться высокие рабочие температуры	Химическая, нефтехимическая, газовая промышленность
Адсорбция	Может быть высоко энергетически эффективной. Высокая степень очистки. Низкие температуры	Большие капитальные затраты. Необходимость циклической регенерации адсорбента	Очистка углеводородов, нормальных парафинов
Жидкостная экстракция	Может быть энергетически эффективной. Умеренные рабочие температуры	Большие капитальные затраты. Необходимость регенерации экстрагента	Разделение близкипящих смесей, термически нестойких веществ
Экстракция сверхкритическими экстрагентами	Энергетическая эффективность. Легкость регенерации экстрагента	Высокие капитальные затраты. Высокие температура и давление	Пищевая промышленность
Мембранные процессы	Высокая энергетическая эффективность. Низкие рабочие температуры	Ограниченная производительность. Низкая прочность мембран	Разделение газов. Очистка воды
Выпаривание	Может быть энергетически эффективным	Большие капитальные затраты	Разделение смесей с нелетучими веществами

Несмотря на различную физико-химическую природу рассмотренных выше процессов, разработка математических моделей каждого из них и методология определения параметров во многих аспектах имеет много общего. Прежде всего для каждого из процессов характерны такие этапы, как исследование условий химического и фазового равновесия, причем для большинства из них по единой методологии и одним и тем же моделям; оценка гидродинамической структуры систем с двумя (и более) фазами применительно к выбранному типу оборудования; оценка параметров кинетических закономерностей (коэффициентов массопередачи, площади поверхности раздела фаз, коэффициентов диффузии и т. д.) для учета реальных условий массопереноса; установление механизма химических реакций и оценка параметров (для процессов химического превращения, хеморектификации, хемосорбции), выбор разделяющего агента (для комплексов с разделяющими агентами).

Получить достоверные данные расчетным путем для каждого из этапов весьма сложно, поэтому при решении задачи моделирования и, в особенности, проектирования отдельные параметры определяются по экспериментальным данным на лабораторных и промышленных установках.

Взаимодействие основных этапов расчета процессов приведено на рис. 4.5.

На первом этапе ставится задача расчета, включающая характеристики исходного сырья и конечных продуктов, условия ведения процесса, режим эксплуатации (непрерывный, периодический), а также аппаратное оформление (предварительное).

На втором этапе проводится оценка параметров моделей, определяющих данный процесс. Сюда относятся оценка физико-химических, термодинамических и кинетических данных; определение параметров моделей фазового равновесия, гидродинамической структуры потоков, кинетических моделей. Получение такой информации невозможно чисто расчетным путем, поэтому в той или иной степени используется экспериментальный материал (например, данные по свойствам, бинарному фазовому равновесию и т. д.).

Третий этап состоит собственно в решении задачи расчета на микро- и макроуровнях. Моделирование на микроуровне позволяет установить количественные отношения между параметрами модели, а на макроуровне — получить данные с учетом реальных условий протекания процесса. В процессе расчета возможен возврат на любой из уровней для уточнения или изменения как отдельных параметров, так и моделей.

Анализ свойств компонентов и смесей. Уже в первом приближении анализ свойств компонентов позволяет оценить эффективность и даже возможность применения того или иного способа ведения процесса, выявить специфические особенности, его аппаратное оформление. Это прежде всего такие свойства, как терми-

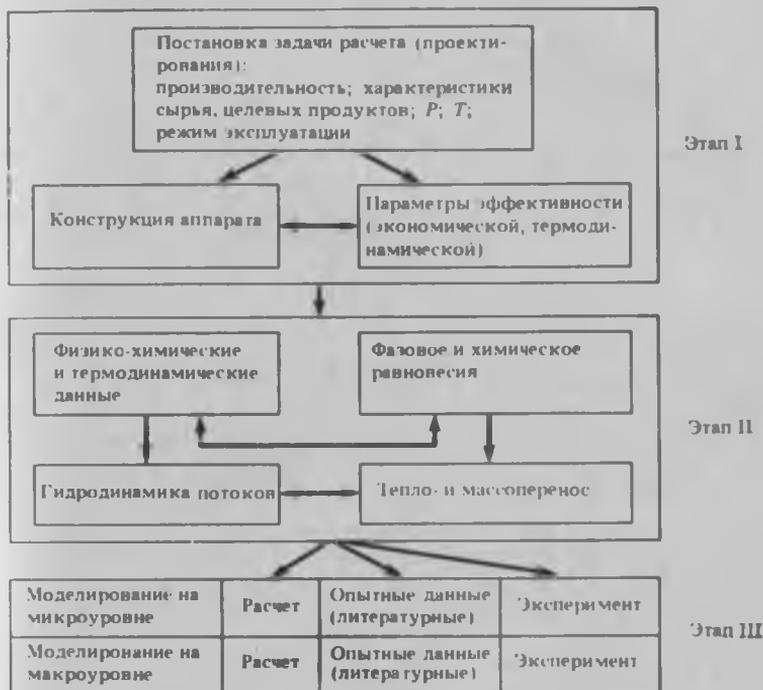


Рис. 4.5. Последовательность разработки технологического процесса

ческая устойчивость, коррозионность, температуры кипения, склонность к полимеризации отдельных компонентов при повышенных температурах. Часто «неблагоприятное» сочетание свойств отдельных компонентов либо вообще снимает вопрос о применимости способа ведения процесса, либо приводит к необходимости обеспечения специальных условий. Например, наличие в разделяемой смеси термически нестойкого вещества требует соответствующего температурного режима (вакуумной ректификации, пониженного давления) или применения другого способа разделения (экстракции адсорбции и т. д.). Аналогично при склонности компонентов к полимеризации (или химическому взаимодействию) необходимо снизить температуру ведения процесса или предусмотреть добавление соответствующего ингибитора, который впоследствии нужно выделить. Соответственно это найдет отражение в аппаратном оформлении процесса (полный барботажный реактор вместо трубчатого и т. д.). Коррозионность вынуждает при выборе оборудования ориентироваться на более стойкие материалы. Ясно, что без соответствующей проработки сделать однозначный выбор способа ре-

ализации процесса весьма сложно. Тем не менее анализ свойств компонентов позволяет все же если не полностью решить вопрос о пригодности того или иного способа ведения и реализации процесса, то ограничить область дальнейших исследований. Наряду с предварительной оценкой пригодности того или иного способа разделения или химического превращения анализ свойств компонентов широко применяется в методах синтеза технологических схем разделения многокомпонентных смесей (в этом случае отдельные свойства выступают в качестве эвристик с соответствующими весовыми коэффициентами).

Более полная информация о способах реализации процесса может быть получена при анализе свойств смеси и отдельных составляющих ее смесей меньшей размерности. Рассмотрим качественно это применительно к стадии выделения целевых продуктов. Обычно смесь, поступающая на разделение, является продуктом химического превращения (это особенно характерно для химических производств) и наряду с целевыми компонентами может содержать исходные реагенты и побочные продукты. При невысокой степени превращения исходные реагенты желательно выделить и вернуть на стадию превращения. Они, таким образом, становятся также целевыми продуктами стадии выделения. Что касается побочных продуктов реакций, то последние, особенно при больших мощностях производства, также могут представлять товарную ценность. Даже не будучи таковыми, они часто должны подвергаться последующей обработке исходя из требований охраны окружающей среды. Следовательно, смесь, поступающая на разделение, может содержать различные по агрегатному состоянию (газообразные или жидкие), по важности (целевые или побочные) и по требованиям на качество продукты. Однако все они составляют единую смесь, свойства которой определяются как свойствами отдельных компонентов, так и степенью их взаимодействия. При наличии неконденсирующихся компонентов (критическая температура которых ниже температуры смеси) возникает вопрос о целесообразности изменения условий или выделения газовой и жидкой фаз на первом этапе разделения.

Изменение условий обычно связано с повышением (понижением) температуры (что не всегда желательно) и ростом капитальных и энергетических затрат. Поэтому обычно на первой стадии проводится разделение смеси на газовую и жидкую фазы (что при большой разности температур не представляет труда) с последующей раздельной их переработкой. Причем газовая фаза в дальнейшем может быть разделена как ректификацией (при повышенном давлении), так и другими способами (абсорбцией, мембранными процессами, адсорбцией и т. д.). Выбор того или иного способа будет опять определяться в значительной степени свойствами смеси.

Среди свойств жидкой фазы, существенно влияющих на выбор



Рис. 4.6. Взаимосвязь свойств многокомпонентной смеси

ректификации как метода разделения, следует выделить степень отклонения от идеальности (наличие азеотропов — гомогенных и гетерогенных) и разных температур кипения (близко- и ширококипящие смеси). В общем случае эти свойства смеси связаны между собой по схеме, представленной на рис. 4.6.

Основным источником информации для проведения анализа свойств смеси являются экспериментальные данные, полученные на лабораторных установках или со стадии химического превращения. Проводится он в большей степени качественно, хотя легко формализуется при реализации на ЭВМ. Следует заметить, что при этом необходимо также оценить влияние температуры и давления на свойства смеси с целью предупреждения неблагоприятных побочных эффектов при конкретной реализации (осмоления, разложения целевых продуктов, появления других химических реакций и т. д.).

Предварительный анализ свойств компонентов и смеси уже позволяет выделить группы альтернативных способов получения чистых компонентов, однако в большей степени полезен при выполнении анализа фазового и химического равновесия, так как сужает область экспериментальных и расчетных исследований. Например, если смесь относится к гомогенным без азеотропов с большой разностью температур кипения, но содержит компонент (или компоненты) с повышенной коррозионной способностью, то ее разделение может быть обеспечено обычной ректификацией (возможно, с применением аппаратов однократного испарения). Расчет этих процессов не представляет труда, однако, очевидно, особое внимание должно быть уделено подбору материала оборудования. С другой стороны, при наличии азеотропов число возможных способов разделения возрастает (азеотропно-экстрактивная ректификация, вакуумная ректификация или под давлением, мембраны, кристаллизация и т. д.). Ясно, что выбор оптимального способа разделения должен производиться на основе более полного расчетного и, возможно, экспериментального исследования.

Итак, чтобы сделать вывод (в первом приближении) о пригодности одного из способов выделения чистого продукта, необходимо, по крайней мере, располагать следующими данными о свойствах компонентов и смеси. Свойства компонентов: коррозионность, сложность к полимеризации, термичная стойкость, температура кипения. Свойства смеси: многофазность, наличие азеотропов, склонность к полимеризации, температура кипения.

Исследование условий фазового и химического равновесия. Знание условий фазового и химического равновесия позволяет не только принципиально решить вопрос о возможности разделения смеси методами ректификации, экстракции и т. д. или определить степень превращения в случае обратимых химических реакций, но и найти оптимальную схему разделения или условия проведения реакции. Данные по равновесию частично имеются в литературе, однако в большинстве случаев их необходимо либо измерять непосредственно, либо рассчитывать. Непосредственное измерение обычно связано с большими затратами времени и средств. Поэтому чаще всего приходится прибегать к расчетным методам получения равновесных данных на основе минимального объема экспериментальных параметров. Поскольку точность данных определяет качественные и количественные характеристики результатов расчета, необходимы точные базисные данные, равно как и надежные методы расчета.

Наиболее точный метод расчета равновесия основан на применении некоторого уравнения (уравнения состояния) ко всем фазам системы. Это уравнение является математическим соотношением между параметрами состояния системы — чистого вещества или смеси. С его помощью можно описать не только свойства фаз, такие, как давление, температуру, объем, но и рассчитать энтальпию, энтропию, фугитивности или химические потенциалы и, таким образом, определить равновесие.

Уравнения состояния либо основаны на теоретических предположениях, либо эмпирические. Примером последних является уравнение Бенедикта—Вебба—Рубина [19]. Оно широко применяется при расчете производств газовой и нефтеперерабатывающей промышленности, но достаточно трудоемко из-за того, что необходимо большое количество экспериментальных данных для определения параметров. Другим недостатком его является пригодность лишь к системам неполярных веществ с аналогичными свойствами (например, к природному газу).

В химической технологии уравнения состояния применяются только для паровой фазы (например, вириальное уравнение), а жидкая и твердая фазы рассчитываются в терминах отклонения от идеального поведения с учетом реальных условий смешения и теории растворов (для жидкостей).

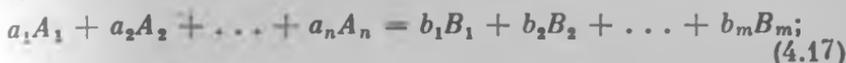
При рассмотрении многофазных систем условие фазового равновесия термодинамически выражается через равенство химиче-

ских потенциалов фаз по каждому компоненту смеси, т. е.

$$\mu_{1i} = \mu_{2i} = \dots = \mu_{ki}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (4.16)$$

где μ — химический потенциал, равный частной производной изобарно-изотермического потенциала (свободной энергии Гиббса) по составу при постоянных давлении и температуре.

Общее условие химического равновесия в многокомпонентной системе также выражается через химические потенциалы компонентов реакции. Так, для химической реакции, протекающей в идеальной газовой фазе, имеем



$$\sum_{i=1}^n a_i \mu_i = \sum_{i=1}^m b_i \mu_i, \quad (4.18)$$

где a_i , b_i — стехиометрические коэффициенты исходных веществ и конечных продуктов реакции; A_i , B_i — концентрации исходных компонентов и продуктов реакции.

Если в (4.18) подставить выражение для химического потенциала $\mu_i = \mu_0 + RT \ln P$, то после соответствующих преобразований для константы химического равновесия можно записать

$$\frac{Y_{B_1}^{b_1} Y_{B_2}^{b_2} \dots Y_{B_m}^{b_m}}{Y_{A_1}^{a_1} Y_{A_2}^{a_2} \dots Y_{A_n}^{a_n}} = P^{\sum_{i=1}^n a_i - \sum_{i=1}^m b_i} K(T), \quad (4.19)$$

где Y_i — концентрация компонентов газовой смеси; P — давление системы.

Из (4.19) следует, что при изменении давления равновесный состав будет меняться в зависимости от соотношения стехиометрических коэффициентов a_i и b_i . Если реакция идет без изменения общего числа молей в системе (т. е. $\sum_{i=1}^n a_i = \sum_{i=1}^m b_i$), то давление не влияет на равновесный состав. Температурная зависимость равновесного состава определяется характером температурной зависимости константы равновесия (возрастающей или убывающей функцией температуры). Заметим, что уравнение (4.19) носит название закона действующих масс.

Если некоторые из компонентов реакции (4.17) находятся в конденсированном состоянии, то при незначительных изменениях внешнего давления концентрации их не указываются в левой части уравнения (4.19), однако при вычислении константы равновесия через свободную энергию Гиббса учитывается конденсированное состояние этих компонентов.

Заметим, что фазовое равновесие в замкнутых системах достигается при наличии в системе химического равновесия. Поэтому

расчет равновесия в системах, в которых происходит несколько одновременно протекающих реакций, представляет определенные трудности. Некоторые из подходов к этой задаче можно найти в [20, 21].

Описание условий фазового и химического равновесия через химические потенциалы имеет недостаток то, что эти величины не поддаются непосредственному измерению. Поэтому для получения расчетных соотношений необходимо выразить их через параметры состояния системы. Такой подход термодинамически обоснован при рассмотрении идеальных систем, когда имеются уравнения состояния. Однако для реальных систем до настоящего времени отсутствует общепринятое уравнение состояния реального газа, в связи с чем вывод соотношений для термодинамических функций и описания условий равновесия крайне затруднен. С использованием функции фугитивности условие равновесия реальных систем выражается как

$$f_i^{(1)} = f_i^{(2)} = \dots = f_i^{(k)}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (4.20)$$

где $f_i^{(j)}$ — фугитивность, определяемая тем, что: а) термодинамические соотношения справедливы для идеальных и реальных систем; б) совпадает с давлением, если последнее настолько мало, что газ становится идеальным. Если исходить из определения фугитивности идеального раствора как смеси компонентов, молекулы которой ведут себя так же, как и в чистой жидкости, а неидеальность поведения выразить введением меры неидеальности в виде коэффициентов, то фугитивности отдельных компонентов должны быть пропорциональны концентрациям, т. е. можно записать

$$\gamma_i^{(1)} x_i^{(1)} f_i^{(1)OL} = \gamma_i^{(2)} x_i^{(2)} f_i^{(2)OL} = \dots = \psi_i f_i^{OV}, \quad (4.21)$$

где ψ_i и γ_i — коэффициенты, характеризующие неидеальность паровой и жидкой фаз — коэффициенты летучести и активности соответственно; f_i^{OL} и f_i^{OV} — фугитивности компонентов в стандартных условиях.

Если паровая фаза подчиняется законам идеальных газов, то вместо f_i^{OV} можно использовать P , т. е. давление системы. Аналогично при умеренных давлениях вместо f_i^{OL} можно использовать P_i^L — давление пара чистого компонента. Таким образом, условие равновесия двухфазной системы запишется в виде

$$\gamma_i x_i P_i^L = \psi_i y_i P, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (4.22)$$

Это уравнение является основным при расчете фазового равновесия многокомпонентных смесей. Коэффициенты активности и фугитивности характеризуют степень отклонения фаз от идеальности. Для идеальных смесей они равны единице.

Аналогично уравнение (4.19) можно распространить на реальные системы, если воспользоваться выражением для фугитивностей фаз из соотношения (4.22).

Итак, для определения равновесных составов фаз и констант химического равновесия необходимо иметь выражения для коэффициентов активности и фугитивности.

Широкое распространение для расчета коэффициентов активности получили модели, основанные на концепции локального состава [22]. Основная идея этой концепции состоит в том, что для молекул с сильной ориентацией принимается во внимание склонность к сегрегации, т. е. существование локального порядка. Молекулы не смешиваются в произвольном порядке, а проявляют тенденцию к выбору ближайших соседей. А поскольку имеется локальный порядок, то локальный состав не равен общему составу. Локальный состав, определенный относительно центральной молекулы, является концептуальным и трудно поддается измерению. Чтобы связать его с общим составом смеси, постулируется соотношение, предложенное в статистической механике: для каждой гипотетической жидкости отношение локальных составов полагается равным отношению общих составов, умноженному на фактор Больцмана. Исходя из этой концепции, Вильсон [22] предложил для расчета коэффициентов активности уравнение

$$\ln \gamma_i = 1 - \ln \left(\sum_{j=1}^n x_j \lambda_{ij} \right) - \sum_{l=1}^n \frac{x_l \lambda_{li}}{\sum_{j=1}^n x_j \lambda_{lj}}, \quad (4.23)$$

где $\lambda_{ij} = \frac{V_j}{V_i} \exp\left(-\frac{\lambda_{ij} - \lambda_{ji}}{RT}\right)$ — параметры уравнения; V — мольный объем компонента. От известных ранее уравнений (типа Маргулеса, Ван-Лаара, Редлиха—Кистера) это уравнение отличается тем, что для определения его параметров необходимы лишь бинарные равновесные данные. Применимость этого уравнения для описания неидеальности жидких фаз многократно доказана и общезвестна.

Наряду с уравнением Вильсона широкое распространение получило уравнение НРТЛ, основанное опять же на концепции локального состава, но предполагающее существование в растворе молекул двух типов (двухжидкостная модель раствора) [23]:

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_j \tau_{ji} A_{ji} x_j}{\sum_l A_{li} x_l} + \sum_j \frac{x_j A_{ij}}{\sum_l A_{li} x_l} \left(\tau_{ij} - \frac{\sum_l \tau_{li} A_{lj} x_l}{\sum_l A_{lj} x_l} \right), \quad (4.24)$$

где $A_{ji} = \exp(-\alpha_{ji} C_{ji}/(RT))$; $\tau_{ji} = C_{ji}/(RT)$; $C_{ji} = g_{ji} - g_{ii}$.

Особенность этого уравнения состоит в том, что оно пригодно для описания равновесия в частично смешивающихся системах.

Термодинамическое соотношение для определения коэффициента летучести в общем случае записывается следующим образом [24, 24]:

$$\ln \varphi_i = \frac{1}{RT} \int_0^{\infty} \left[\left(\frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T, V, n_{j \neq i}} - \frac{RT}{V} \right] \ln z. \quad (4.25)$$

С использованием вириального уравнения состояния со вторым вириальным коэффициентом $z = PV/(RT) = 1 + B/v + \dots$ уравнение (4.25) записывается в виде

$$\ln \varphi_i = \frac{z}{v} \sum_j y_j B_{ij} - \ln z, \quad (4.26)$$

где $z = 1 + (\sum_i \sum_j y_i y_j B_{ij})/v$; B_{ij} — второй вириальный коэффициент смеси компонентов i и j .

Как уже отмечалось, основные соотношения для определения равновесного состояния содержат параметры, которые необходимо определить по экспериментальным данным. К таким данным относятся данные типа $P-Y-T$, бинарные равновесные данные, некоторые физико-химические параметры. В статической механике получены общие выражения вириальных коэффициентов через функцию потенциальной энергии межмолекулярного взаимодействия (например, Леннарда—Джонса, Стокмейера). На практике эти коэффициенты чаще определяют по $P-Y-T$ для соответствующих газов [20].

Применительно к изобарическим данным функциональная зависимость коэффициентов активности может быть выражена в виде

$$\gamma = \gamma(x_1, x_2, T, \xi_1, \xi_2 \dots), \quad (4.27)$$

где ξ_i ($i = 1, 2, \dots$) — определяемые параметры.

Задача нахождения параметров практически сводится к минимизации некоторого функционала, характеризующего связь между расчетными и экспериментальными данными методами нелинейного программирования. В качестве критерия минимизации используется функция вида

$$R(\xi_1, \xi_2 \dots) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (z_j^{\text{эксп}} - z_i^{\text{расч}})^2 / n}. \quad (4.28)$$

Достоинством уравнений Вильсона и НРТЛ является то, что для определения параметров достаточно иметь только равновесные данные по всевозможным парам компонентов смеси.

Математическое описание равновесия многокомпонентных смесей позволяет выявить как основные закономерности рассматриваемой системы, так и ее особенности. Это исследование наряду

с анализом физико-химических и термодинамических свойств имеет целью существенно автоматизировать этап выбора способа ведения процесса и разработки технологической схемы. К основным задачам анализа равновесия следует отнести следующие вопросы.

1. Анализ химического равновесия с целью определения оптимальных условий ведения стадии химического превращения.

2. Определение областей расслаивания жидкой фазы и воспроизведение последних при расчете массообменных процессов (азеотропно-экстрактивной ректификации, экстракции, декантации).

3. Выбор разделяющего агента для повышения эффективности разделения близкокипящих или азеотропных смесей.

4. Определение азеотропных (гомогенных или гетерогенных) составов и воспроизведение последних при расчете аппаратов.

5. Определение разделяющих многообразий симплекса составов многокомпонентной смеси для выявления областей непрерывной ректификации.

Энергетический (термодинамический) анализ. В общем случае создание энергосберегающих химических производств ведется по следующим направлениям.

1. Оптимизация существующих производств с целью определения наилучших условий процессов как с точки зрения целевых продуктов, так и энергосбережения. Это может привести к усовершенствованию отдельных стадий производства, изменению его топологии и в итоге к более рациональному использованию энергии потоков.

2. Поиск новых, более совершенных технологических решений при реализации стадий производства, включая введение подсистем рекуперации вторичных энергоресурсов.

3. Применение совмещенных процессов с целью рационального объединения источников и стоков энергии внутри технологической схемы.

Вряд ли следует искать единственный метод (способ) эффективного решения перечисленных задач. Более глубокое понимание и изучение отдельных процессов, совершенствование технологии и аппаратурных решений, применение стратегии системного анализа, автоматизация управления отдельными стадиями и производством в целом — все это способствует созданию более совершенных производств.

Высокая эффективность отдельных процессов и стадий еще не гарантирует оптимальности всего производства в силу неаддитивности критерия оптимальности. Энергетическая эффективность производства определяется тем, насколько полно используется подаваемая извне и производимая внутри энергия, т. е. насколько низки ее непроеизводительные потери. Часто при проектировании отдельных элементов схемы не учитывается соотношение энергетических уровней, что исключает эффективное использование вто-

ричных энергоресурсов. Идеальным вариантом организации производства является энергообеспечение за счет экзотермических процессов.

Энергетические потери принято разделять на две группы с точки зрения их распределения [25]: внутренние, связанные с необратимостью процессов, протекающих внутри системы; внешние, связанные с условиями взаимодействия системы с окружающей средой и другими источниками и стоками энергии.

В химическом производстве потери за счет необратимости протекания процессов проявляются вследствие конечных разностей температур и концентраций при массо- и теплообмене, смешения неравновесных потоков, гидравлического сопротивления и т. д. К внешним потерям относятся те, которые связаны с потерями через тепловую изоляцию, с продуктами, энергия которых не используется внутри системы, например с дистиллятом и кубовым остатком ректификационной колонны, охлаждающей водой или воздухом и т. д., т. е. в результате неорганизованного теплообмена с окружающей средой.

Эксергетический метод анализа, основанный на втором начале термодинамики, позволяет оценить степень использования энергии, ее потери, а также получить распределение этих потерь по отдельным аппаратам производства, т. е. выявить наименее эффективные из них. В основе эксергетического анализа лежит понятие эксергии. «Эксергия системы в данном состоянии определяется количеством энергии, не характеризующейся энтропией, которое может быть получено от системы или передано ей в результате обратимого перехода системы из данного состояния в состояние полного термодинамического равновесия с окружающей средой» [25].

Согласно закону Гюи—Стодола потери эксергии пропорциональны увеличению энтропии системы:

$$\Delta E = T_0 \Delta S, \quad (4.29)$$

где T_0 — температура окружающей среды; ΔS — сумма приращений энтропии.

Практическое преимущество эксергии состоит в том, что ее уменьшение дает величину потерь превратимой энергии и позволяет оценить ее по сравнению со всей имеющейся превратимой энергией. Использование эксергетического анализа основано на составлении эксергетического баланса потоков аппарата или системы, куда (для химических производств) включаются физическая составляющая, равная

$$E_1 = \Delta H - T_0 \Delta S, \quad (4.30)$$

и химическая, равная

$$E_2 = \sum_i \Delta \mu_i N_i, \quad (4.31)$$

где ΔH — энтальпия; μ — химический потенциал, отсчитываемый от состояния равновесия с окружающей средой; N_i — количество молей i -го компонента технологического потока.

Поскольку все реальные процессы необратимые, баланс для какого-либо элемента схемы записывается с учетом потерь эксергии, т. е. в виде

$$E_{вх} = E_{вых} + \Delta E, \quad (4.32)$$

где $E_{вх}$ — эксергия входного технологического потока; $E_{вых}$ — эксергия, преобразованная в полезную работу. Для количественного сравнения процессов можно воспользоваться эксергетическим КПД:

$$\eta_{экс} = E_{вых}/E_{вх} = E_{вых}/(E_{вых} + \Delta E). \quad (4.33)$$

Последний удобен для сравнения однотипных процессов химической технологии, так как неравенство КПД свидетельствует о возможностях совершенствования одного из них за счет снижения необратимости или более эффективного использования продуктов. Применение эксергетического анализа весьма эффективно при исследовании также химико-технологических систем на основе балансов, имеющих большое количество источников и стоков энергии. С помощью такого подхода решаются задачи создания энергетически замкнутых химических производств, поскольку имеется возможность как оценки внутренних и внешних потерь, так и потенциалов энергетических потоков. Метод широко используется при расчете теплообменных систем [26, 27], сравнительной оценке различных способов разделения многокомпонентных смесей [28, 29], анализе химико-технологических систем [30, 31].

Экономическая оценка проекта. Хотя в процессе решения проектных (как и любых других) задач используются на различных стадиях различные критерии, в наиболее общем виде качество работы той или иной установки важно выполнить используя показатели экономической эффективности. Так или иначе любая работа по созданию химического производства должна оцениваться экономическими показателями, однако на отдельных этапах удобнее воспользоваться другими критериями ввиду удобства их применения. Например, при решении итерационных задач по моделированию отдельных процессов лучше воспользоваться критериями, определяющими условия сходимости. Это выполнение материального и теплового баланса, равенство суммы концентраций в мольном измерении единице и т. д. Обычно они относительно просто выражаются через управляющие параметры в виде функционалов, суммы квадратов отклонений, аддитивных функций и содержат параметры, наиболее ярко характеризующие экстремальные свойства критерия. Конечные значения таких критериев определяют рабочие характеристики соответствующих программ, такие, как точность, быстрдействие и т. д. Тем не менее затраты

на выполнение расчетов будут оцениваться по экономическим показателям.

Трудность применения критериев на основе экономических показателей состоит в неоднозначности определения отдельных статей расходов (в зависимости от времени и места строительства), сложности установления связи между характеристиками совершенства процессов и их экономической эффективностью. Например, термодинамически эффективный процесс может быть (и чаще всего) экономически невыгодным, так как, например, для снижения необратимости процесса необходимо увеличивать капитальные затраты с целью уменьшения движущей силы (разности концентраций контактирующих фаз, разности температур).

Критерий оптимальности экономической эффективности представляет собой некоторую функцию

$$R = R(V, \Phi, \Xi, K), \quad (4.34)$$

где V — производительность — количество единиц продукции в единицу времени; Φ — объем капитальных вложений; Ξ — эксплуатационные расходы на обслуживание производства; K — качественные показатели выпускаемого продукта.

Конкретное выражение функции R получается в результате тщательного и всестороннего экономического анализа производства. Наиболее часто используемыми экономическими критериями оптимальности являются себестоимость, прибыль, норма прибыли и приведенные затраты [32].

Себестоимость выпускаемой продукции представляет собой полные затраты на производство единицы выпускаемой продукции и определяется как

$$Z_{\text{пр}} = Z_c + Z_r + (\Phi + P - Л)/(ВТ) + Z_p/V, \quad (4.35)$$

где Z_c , Z_r — стоимость сырья и текущие расходы на единицу продукции; P — затраты на ремонт оборудования; $Л$ — ликвидационная стоимость фондов; Z_p — расходы на профилактический ремонт, реализацию готовой продукции, зарплату ИТР; T — время эксплуатации.

Себестоимость как критерий имеет тот недостаток, что не учитывает качество выпускаемой продукции. Роль показателя качества становится ясной лишь при ценообразовании. В связи с этим находит применение другой критерий — прибыль, равная разности между ценой и себестоимостью, умноженная на производительность. Недостатком этого критерия является его неспособность учета источника прибыли (за счет производительности или себестоимости).

Норма прибыли определяется как отношение суммы прибыли, получаемой от реализации продукции, к полным затратам на выпуск этой продукции. Этот показатель уже позволяет учитывать составляющие прибыли и выявлять резервы производства.

Наиболее часто применяемым критерием экономической эффективности является показатель приведенных затрат

$$\Pi = Z_{\text{пр}} + E_n \Phi / B, \quad (4.36)$$

где E_n — отраслевой нормативный коэффициент эффективности капитальных затрат.

В последнее время получили распространение термозэкономические критерии на основе оценки стоимости эксергии, позволяющие учитывать экономическую и термодинамическую эффективность производства. В общей форме термозэкономический критерий оптимальности имеет вид

$$\min_{\{u\}} C = \min_{\{u\}} \left\{ \frac{\sum_i C_{e_i} E_i + \sum_i K_i}{\sum_i E_{p_i}} \right\}, \quad (4.37)$$

где C — стоимость единицы эксергии продукции; E_i — эксергия потребляемого производством сырья и продукции; C_{e_i} — стоимость единицы эксергии потоков сырья и энергии; E_{p_i} — эксергия потоков продукции; K — капитальные и другие сопряженные с производством затраты; $\{u\}$ — совокупность значений оптимизирующих параметров, на которых производится поиск оптимума.

Основным вопросом при использовании термозэкономического критерия оптимизации является вопрос оценки стоимости единицы эксергии потоков системы [33].

4.1.3. Выбор технологической схемы

Декомпозиция общей задачи синтеза на отдельные подзадачи (синтез стадии химического превращения, синтез стадии выделения продуктов, синтез теплообменной системы) существенно упрощает проблему разработки технологической схемы, однако снижается и вероятность получения действительно оптимального варианта вследствие неадекватного воспроизведения взаимосвязей между подзадачами. Поэтому процесс выбора технологической схемы является итерационным, с внесением изменений в стратегию поиска оптимального решения на каждой из стадий.

По существу, выбор технологической схемы производится при известных значениях (возможно, лишь начальных) вектора входных переменных M , совокупности химических реакций R (эти данные известны благодаря выполнению первого этапа проектирования технологической схемы), совокупности способов ведения отдельных процессов Q (из этапа выбора способа ведения процесса). Он состоит в выборе таких подмножеств M' , R' , Y' и Q' , которые бы обеспечивали выполнение критерия (4.1) с заданной точностью, т. е. получение технологической схемы

$$g_i \in G \{ (M' \subset M) \cup (R' \subset R) \cup (Q' \subset Q) \} \quad (4.38)$$

с учетом требований по энергетике, непроизводительным расходам материалов и охране окружающей среды. Прямой перебор всех вариантов множества G практически невозможен даже на современных ЭВМ. Поэтому необходима определенная стратегия поиска, эффективность которой зависит от степени изученности отдельных явлений.

Любая технологическая схема может рассматриваться как совокупность элементов, соединенных определенным образом (в общем случае не единственным), позволяющая перерабатывать входную информацию в желаемую выходную. После определения совокупностей M , R , Q и разработки или подбора соответствующих моделей, т. е. при определенной размерности обобщенного технологического оператора

$$T = (t_1, t_2, \dots, t_k), \quad (4.39)$$

где $t_i \in Q$, необходимо выполнить этап упорядочения элементов вектора T таким образом, чтобы выполнялось функциональное соотношение (4.2) при условии (4.1).

Таким образом, при решении задачи синтеза необходимо, во-первых, определить совокупность элементов технологических схем (т. е. выбрать соответствующие типы преобразователей информации) и разработать математические модели для каждого из них и, во-вторых, разработать алгоритмы формирования технологических схем, т. е. математических моделей для установления последовательности их соединения для решения задач химического производства.

В зависимости от типа элементов схемы (однородные или неоднородные) задача синтеза технологической схемы может ставиться по-разному. При выборе технологической схемы с однородными элементами (теплообменной системы, системы разделения многокомпонентных идеальных смесей методом ректификации) обычно отсутствует исходный вариант схемы и элементы могут соединяться между собой самыми различными способами. Задача состоит в том, чтобы найти оптимальный вариант их соединения (оптимальный в смысле критерия). В случае теплообменной системы задача синтеза может быть сформулирована следующим образом [34]. Имеется M горячих потоков S_{hj} ($j = 1, 2, \dots, M$), которые необходимо охладить, и N холодных потоков S_{cj} ($j = 1, 2, \dots, N$), которые необходимо нагреть. Для каждого потока заданы начальная T_n , конечная T_k температуры и водяной эквивалент. Имеются также вспомогательные нагреватели и холодильники. Задача синтеза состоит в том, чтобы создать систему из рекуперативных теплообменников, нагревателей и холодильников, которая позволила бы достичь заданных конечных температур потоков при минимуме полной стоимости системы при заданных стоимостях элементов.

При выборе технологической схемы с разнородными элементами их взаимосвязи в некотором смысле определены, т. е. имеется исходный вариант технологической схемы. В этом случае синтез схемы состоит в выработке стратегии модификации исходного варианта таким образом, чтобы за минимальное число шагов получить оптимальный вариант. В процессе синтеза, естественно, могут частично изменяться и взаимосвязи элементов, т. е. соединения аппаратов. В этом смысле синтез технологической схемы с разнородными элементами аналогичен оптимизации действующих производств, соответственно могут использоваться аналогичные методы. Данные, полученные на этапе выбора способов ведения процесса, могут быть использованы в качестве начальных при синтезе.

Следует заметить, что синтез технологической схемы при известном начальном варианте является более общим, поскольку в случае соединения однородных элементов при наличии рециклических потоков (обратных связей) возникает необходимость последующей оптимизации схемы. Например, при синтезе схемы разделения реальной смеси получаемый вариант схемы может служить в дальнейшем для его усовершенствования. Исходный вариант в зависимости от метода синтеза является либо простейшей схемой производства, либо некоторой гипотетической схемой, включающей все возможные варианты соединения аппаратов, на основе которой получается одна (или несколько) схем, попадающих в окрестность квазиоптимальных.

4.1.4. Выбор оборудования

Выбор оборудования производится с учетом физико-химических свойств веществ и потоков, технологических параметров отдельных аппаратов и их эффективности. Несмотря на специфику требований этого этапа в каждом конкретном случае удается сформулировать их в форме, доступной для машинной реализации.

По существу, задача выбора оборудования решается с самого начала разработки технологической схемы (см. рис. 4.5), уже при выборе способа реализации процесса. Задав конструкцию аппарата, тем самым выбрано семейство аппаратов, отличающихся лишь геометрическими размерами. Гидродинамика потоков внутри аппарата, его эффективность определяются конструктивными особенностями. Поэтому этап выбора оборудования не может рассматриваться обособленно, без оценки гидродинамической обстановки, условий тепломассопереноса, гидравлических расчетов. Всякий раз при изменении геометрических размеров аппарата возникает необходимость повторения указанных расчетов, поскольку меняются параметры, определяющие его эффективность (например, скорость движения фаз, продольное перемешивание и т. п.). Основой для выбора оборудования обычно являются

ГОСТы, ОСТы или ведомственные нормалы, определяющие стандартные ряды типового оборудования. В последнее время проводятся работы и по стандартизации гидродинамической структуры потоков в отдельных аппаратах (например, в реакторах с мешалками), что существенно сокращает время выбора необходимого оборудования. Выбор оптимальной конструкции аппарата и его типоразмеров является итерационной задачей и поэтому любая информация об эффективности в конкретных условиях эксплуатации лишь упростит процедуру расчета.

4.2. Алгоритмизация этапов проектирования химических производств

Системный подход к разработке технологических схем имеет целью получение оценок функционирования на любом уровне декомпозиции общей задачи на основе математических моделей. Создавая математическую модель, разработчик формализует рассматриваемый процесс или элемент, представляя его в виде математической связи между входными и выходными параметрами:

$$j = f(x, y, u). \quad (4.40)$$

Точность воспроизведения сущности рассматриваемого процесса на модели будет зависеть от степени его изученности. При этом задание аналитической связи между входными, выходными параметрами и управляющими переменными не обязательно. Предполагается, что всегда найдется алгоритм, позволяющий по известным входным и управляющим переменным вычислить значения выходных переменных.

Основу математической модели составляет его математическое описание, формулируемое на базе фундаментальных исследований в области термодинамики, химической кинетики, явлений переноса, статистических методов обработки экспериментальных данных. С точки зрения машинной реализации математическому описанию свойственны причинно-следственные отношения между элементами, так как отдельные модели по своей структуре содержат большое число взаимосвязанных подзадач. В этом смысле к математической модели процесса применимы общие принципы системного анализа, что находит выражение в использовании блочного принципа ее построения.

Модели проектирования типовых процессов, синтеза, выбора оборудования и т. д. составляют прикладное математическое обеспечение. Разнородность решаемых задач при разработке технологической схемы приводит к разнообразию и моделей, которыми необходимо располагать. Следует заметить, что на каждом из этапов возможна различная постановка задачи расчета, как и различное описание одного и того же объекта. Эта многовариантность будет выражаться в многообразии моделей.

Эффективное применение математического обеспечения возможно лишь при наличии стройной организационной структуры и максимальной независимости от пользователя при решении конкретной задачи. Следовательно, оно должно быть систематизировано и логически объединено в САПР.

Математический образ реального процесса (оператор L в уравнении (4.3)) представляет собой совокупность модулей или металлгоритмов P , реализующих функции САПР. Множество P естественным образом, исходя из совокупности рассматриваемых явлений (см. рис. 4.2) и принципов системного анализа, распадается на ряд подмножеств

$$P = \bigcup_i P_i, \quad (4.41)$$

где P_i соответствуют подсистемам САПР.

Таким образом, система проектирования может быть представлена в виде отдельных подсистем, которые являются реализацией этапов разработки технологической схемы и содержат логически взаимосвязанные подмножества алгоритмов программно-математического обеспечения. К ним можно отнести а) подсистему информационного обеспечения, содержащую алгоритмы расчета свойств веществ и смесей, модули поддержания и ведения функциональной среды подсистемы, модули выбора типового оборудования и технологических схем; б) подсистему технологического расчета единиц оборудования и их комплексов в проектом и проверочном вариантах; в) подсистему синтеза стадий производства и технологической схемы в целом, содержащую модули анализа условий равновесия, расчета балансов, алгоритмы синтеза; г) подсистему конструкционного расчета оборудования, содержащую модули расчета типоразмеров оборудования, алгоритмы выбора оборудования из рядов стандартов; д) подсистему оценки (экономической, термодинамической и т. д.) варианта схемы, способа реализации процесса и т. д.; е) подсистему диалогового взаимодействия, обеспечивающую интерактивное введение процесса проектирования.

Помимо определенных таким образом подмножеств в рамках системы целесообразно выделить подмножество модулей, являющихся общими для различных подсистем, которые составляют библиотеку специальных и стандартных алгоритмов. К ним можно отнести статистические методы обработки данных, методы оптимизации, стандартные методы вычислительной математики и т. п. Выделенные подмножества составляют основу функциональной среды диалоговой системы. Состав прикладного математического обеспечения, необходимого при разработке технологической схемы в соответствии с рис. 4.2, приведен на рис. 4.7.

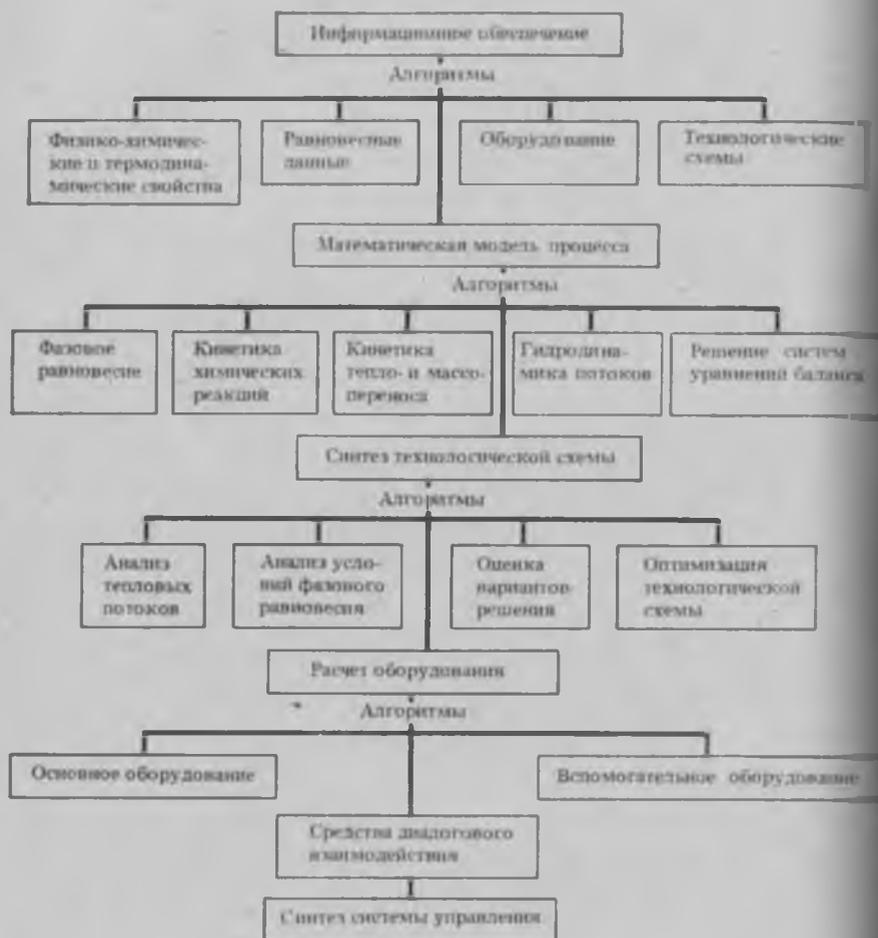


Рис. 4.7. Состав прикладного математического обеспечения САПР

4.2.1. Информационное обеспечение

В химической технологии более 50% исходных данных на проектирование и оптимизацию процессов составляют физико-химические и теплофизические свойства веществ [35]. Причем точность их имеет решающее значение для определения параметров процесса. Другим видом информации, необходимой для работы САПР, являются данные о технологическом оборудовании. Данные по оборудованию необходимы для работы подсистемы конструкционного расчета, а стоимостные характеристики — для оценки эффективности реализации процесса. По существу, это

содержимое ГОСТов на оборудование. Третий вид информации связан с типовыми решениями, составляющими своего рода «память», или «опыт», системы. Эта информация может потребоваться при работе любой из подсистем. Ее наличие может лишь ускорить разработку проекта за счет использования готовых решений на различных этапах создания новой технологической схемы. При решении задач проектирования систем управления, очевидно, потребуются данные о средствах автоматизации, как и о типовых системах управления. Помимо общего характера данных в конкретных приложениях может потребоваться информация самого различного рода, например данные для выполнения строительной части, по источникам сырья, рынкам сбыта и т. д. Эти данные составляют информационную базу системы.

Распространенным способом организации информационного обеспечения является концепция банка данных (или «систем с базовым языком» — по терминологии системного комитета КОДАСИЛ [36]). **Б а н к д а н н ы х** — это организационно-техническая система, состоящая из комплекса модулей, баз данных, технических средств и обслуживающего персонала, которая обеспечивает избыточное хранение и оперативное ведение данных в базах данных, а также независимость прикладных программ от данных. В свою очередь **б а з а д а н н ы х** — это избыточная совокупность логически взаимосвязанных данных, которые могут быть использованы более чем для одного приложения (например, данные по оборудованию, по экономике, физико-химические свойства веществ и т. д.).

В структуре банка данных выделяются две основные части. Это базы данных и система управления базами данных (СУБД). Последняя определяется следующим образом: СУБД — это набор модулей, который не привязан к конкретному набору прикладных программ или файлов; способствует обращению к данным по имени, а не по их физическим адресам; способствует выполнению таких операций над данными, как определение, хранение, ведение и выборка; способствует выражению логических взаимосвязей между элементами данных [37]. СУБД обеспечивает все обмены информацией между подсистемами и базами данных, а также между терминалами и базами данных. Она должна обеспечивать мультизадачную работу на общих базах данных без нарушения достоверности данных, иметь средства защиты данных от несанкционированного доступа, поддерживать сложные структуры данных.

Основным признаком, по которому данные выделяются в базы, является их логическая взаимосвязь. Целью выделения баз данных является разъединение логически не связанной информации, с тем чтобы улучшить эксплуатационные характеристики банка за счет исключения ненужных и случайных данных и собрать воедино данные, которые по логике их применения могут использоваться комплексно; ликвидировать дублирование данных, поскольку

логически связанные данные собраны в одном месте, что позволяет экономить память и повысить их достоверность.

Каждой базе данных ставится в соответствие некоторая структура, отражающая логические взаимосвязи между данными и являющаяся, по существу, их описанием. Описание обычно, кроме логических взаимосвязей данных, содержит и описание некоторых характеристик (например, название, систему счисления и т. д.). Таким образом, база данных логически распадается на две части: описание данных и собственно данные. Изложенные концепции являются общепринятыми и прослеживаются во всех известных базах данных. Большое разнообразие наблюдается при отображении логической организации баз данных на физическую память. Это разнообразие обусловлено спецификой данных, а также возможностями принятого языка программирования. Более подробно эти вопросы будут изложены в гл. 5.

Применительно к задачам химической технологии все данные обычно подразделяются на несколько баз данных, основными из которых являются базы «Физико-химические, термодинамические и теплофизические свойства компонентов и смесей», «Оборудование» и «Технологические решения». Очевидно, состав данных в базе определяется уровнем задач, решаемых САПР. По мере расширения функций САПР в соответствующие базы могут добавляться и необходимые данные. Формирование баз данных является одной из ответственных задач, поскольку необходимо не только определить состав базы, но и выработать однозначную терминологию, согласованную с пользователями. Помимо этого, к базам предъявляются определенные требования, исходя из которых формируются способы представления информации, обеспечивается их достоверность.

База данных «Физико-химические свойства» обычно содержит свойства чистых компонентов, представляемые константами или функциями, которые могут храниться в виде коэффициентов аппроксимирующих зависимостей или в виде таблиц. Представление данных в виде коэффициентов более удобно исходя из объема занимаемой памяти и оперативности выборки, но требует предварительной их обработки. Специфическими требованиями к данным этой базы являются следующие.

А. Свойства, не зависящие от температуры, давления и состава, должны храниться в виде отдельных величин (например, молекулярный вес, критические параметры, энергия межмолекулярного взаимодействия и т. д.).

Б. Свойства, чьи значения зависят от температуры, давления и состава, т. е. $y = f(T, P, x)$, должны представляться в виде коэффициентов соответствующих зависимостей. Например, давление пара чистых компонентов описывается уравнением Рейделя

$$\ln P = A_1 + A_2/T + A_3 T + A_4 \ln T$$

и хранению подлежат коэффициенты A_i ($i = 1, 2, 3, 4$). В некоторых случаях желательно иметь различные функциональные зависимости для одного и того же свойства, что диктуется различными способами описания его в различных прикладных программах.

В. Желательно иметь отдельные свойства для определенных, например нормальных, условий (температуру кипения, теплоту испарения и т. д.).

Г. Для функциональных зависимостей должен быть указан интервал определения параметров (интервал достоверности аппроксимации), поскольку экстраполяция зависимости за область определения параметров приводит к заведомо неверным значениям параметра.

Д. Для каждого данного необходимо иметь ссылку на источник (литературные данные, эксперимент, расчет).

Е. Для каждого данного необходимо хранить величину погрешности его определения.

Ж. При заполнении базы данные должны проверяться на соответствие единиц измерения, а также на совместимость. Например, для критических параметров должно выполняться соотношение

$$P_{кр} \nu_{кр} = z_{кр} R T_{кр}.$$

З. Вносимые данные должны быть лучшими по точности и области определения на данный момент, следовательно, они должны периодически обновляться.

И. База должна быть заполнена полностью; свойства, которые отсутствуют в литературе, должны определяться экспериментально или рассчитываться в процессе заполнения базы.

Помимо перечисленных, база должна обладать специфическими атрибутами. Прежде всего каждый компонент должен однозначно идентифицироваться. Для этого помимо распространенного названия вещества необходимо иметь его синонимы. С учетом этих требований структура данных в базе может быть представлена в виде, приведенном на рис. 4.8.

Одной из важнейших баз при расчете массообменных процессов является база параметров уравнений для описания неидеальности фаз в соответствии с уравнениями (4.23), (4.24), (4.26). Это параметры: $(g_{ij} - g_{ji})$, $(g_{ji} - g_{ii})$ — для уравнения Вильсона; $(\lambda_{ij} - \lambda_{ji})$, $(\lambda_{ji} - \lambda_{ii})$, α_{ij} — для уравнения НРТЛ; вириальные коэффициенты — для расчета коэффициента летучести.

База данных «Оборудование» характеризуется большим количеством разнородной информации и может иметь, например, структуру, представленную на рис. 4.9. Эта структура демонстрирует частный случай описания оборудования, однако дает общее представление о способах формализации описания. В качестве примера можно взять описание тарельчатой ректификационной колонны: вид оборудования — колонна; тип — тарельчатая; определяющая характеристика — 2000; название определяющей харак-



Рис. 4.8. Структура базы данных «Физико-химические свойства»
 мк — массив ключевой; к — ключ; м — массив; с — структура

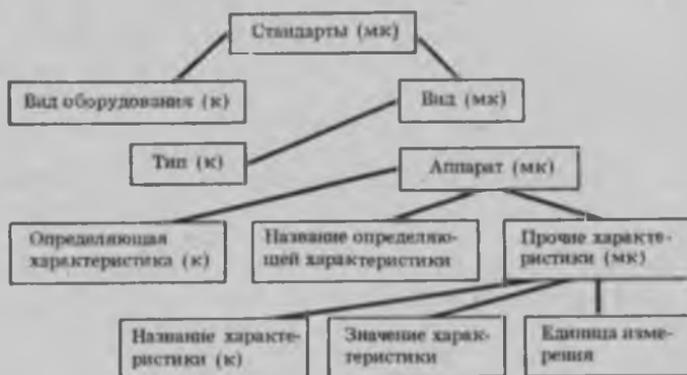


Рис. 4.9. Структура базы данных «Оборудование»
 мк — массив ключевой; к — ключ

теристики — диаметр; название характеристики — высота; единица измерения — м и так далее.

База данных «Технологические решения» содержит данные об известных технологических решениях как по отдельным стадиям производства, так и по целым схемам. Необходимость в таких базах возникает всегда, когда производится сравнение полученного варианта схемы с известными на предмет патентной чистоты, оригинальности, эффективности. Проблемы, возникающие при создании такой базы, заключаются в формализации хранения графич-

технических данных, — выработке критериев оценки оригинальности технических решений.

В простейшем случае работа с базой данных «Технологические решения» может быть легко организована в режиме диалога, когда по соответствующим признакам выбирается нужная схема вместе с описанием ее основных характеристик. Такой режим работы легко организуется с использованием дисплейной техники.

Итак, создание информационной базы САПР состоит в выборе универсальной или разработке специализированной СУБД; определении числа и разработке структуры баз данных; разработке алгоритмов проверки, обработки экспериментальных и расчета недостающих данных; заполнении баз данных. Первые два пункта будут рассмотрены подробнее в гл. 5. Определение числа баз производится на основе обобщения опыта проектирования в данной отрасли и состоит в установлении количества единиц информации базы, согласовании терминологии. Проверка достоверности данных производится путем выявления достоверных параметров при использовании известных закономерностей между отдельными параметрами, либо путем применения методов статистической обработки данных. Часто при обработке данных проводится и проверка их достоверности.

Обработка экспериментальных данных заключается в выборе при определении коэффициентов функциональных соотношений методами статистической обработки данных или методами оптимизации. В общем случае задача ставится следующим образом. Пусть имеется набор экспериментальных данных x_i, y_i ($i = 1, 2, \dots, n$), характеризующих, например, зависимость теплоемкости, давления пара компонента и т. д. от температуры. Требуется установить функциональную зависимость

$$y = (x_1, x_2, \dots, x_k, a_1, a_2, \dots, a_k)$$

и определить коэффициенты a_i . В случае линейной зависимости поиск коэффициентов не представляет труда: можно воспользоваться методом наименьших квадратов. Решение задачи станет сложнее, если функциональная зависимость нелинейная, как, например, при поиске параметров уравнений (4.23) или (4.24), записанных для двухкомпонентной смеси. В виду нелинейной функциональной зависимости поиск параметров в общем случае производится методами нелинейного программирования. Минимизируемая функция, заданная критерием (4.28), имеет, как правило, сложный вид и может содержать как локальные минимумы, так и криволинейные «овраги». Поэтому поиск глобального оптимума представляет определенные трудности — только ограниченное число методов позволяет решить эту задачу. Может оказаться, что решение, т. е. набор параметров, соответствующих минимуму функционала (4.28), зависит от начального приближения. При незначительном отклонении критерия оптимальности пара-

метры существенно различны. Эта особенность критерия ярко проявляется при определении параметров уравнения ПРТГ. Однако точность описания равновесия лежит в пределах погрешности при использовании различных наборов параметров.

Ранее отмечалось, что одним из основных требований к базе является ее полнота. Чаще всего недостающие данные о свойствах рассчитываются по соответствующим эмпирическим и полуэмпирическим зависимостям. К сожалению, расчетные данные не могут конкурировать с экспериментальными по точности. Известные расчетные соотношения обычно справедливы для определенных классов веществ и в ограниченных диапазонах изменения параметров. Поэтому выбор необходимых расчетных формул и последовательности расчета свойств связан со значительной работой по проверке их пригодности.

Таким образом, накопление данных и их обработка должны проводиться с использованием пакета программ. В него входят собственно программы аппроксимации табличных данных, программы обработки данных по фазовому равновесию. Последние соответствуют последовательности подготовки данных, подлежащих записи в базу. Этот комплекс программ основан на алгоритмах проверки термодинамической совместимости равновесных данных, выбора уравнений для описания неидеальности фаз, определения параметров этих уравнений.

Проверка на термодинамическую совместимость обусловлена тем, что экспериментальные данные по фазовому равновесию часто содержат погрешности и могут не удовлетворять термодинамическим соотношениям равновесных систем. В качестве такого соотношения наибольшее применение находит уравнение Гиббса—Дюгема

$$RT \sum_i x_i d \ln \gamma_i + \frac{\Delta H_{см}}{T} dT - \Delta V_{см} dP = 0, \quad (4.42)$$

где $H_{см}$ — теплота смешения компонентов; $\Delta V_{см}$ — изменение объема при смешении.

Алгоритм метода проверки основан на интегрировании уравнения (4.42) при $P = \text{const}$ (изобарические дапные) во всех прилежащих парах экспериментальных значений концентрации компонента в жидкой фазе, записанном для бинарной смеси. В этом случае погрешность в прилежащих равновесных точках ($i-1$) и i выражается как [38]

$$\xi_{i-1,i} = (x_i + x_{i-1}) \ln \frac{\gamma_{1i}}{\gamma_{2i}} + (2 - x_i - x_{i-1}) \ln \frac{\gamma_{2i}}{\gamma_{2,i-1}}. \quad (4.43)$$

По величине отклонения $\xi_{i-1,i}$ от нуля можно судить о достоверности значений концентрации в этих точках, а также проводить частичную коррекцию этих величин.

Сложность определения параметров уравнений (4.23) и (4.24) состоит не только в высокой нелинейности функционала (4.28), но и в том, что не всегда имеются однозначные экспериментальные данные по фазовому равновесию. В связи с этим для определения параметров используются следующие исходные данные.

1. Зависимость давления системы от состава жидкости при $T = \text{const}$ (данные $x-P$).
2. Зависимость температуры кипения смеси от состава жидкости при $P = \text{const}$ (данные $x-T$).
3. Равновесные данные $x-y-P-T$ (при P или $T = \text{const}$). Очевидно, эти данные являются избыточными, поэтому возникает проблема выбора наилучших значений, по которым производится оптимизация. Если данные $x-y$ термодинамически несовместимы, то имеется возможность непосредственного определения коэффициентов активности и избыточной свободной энергии смешения. Тогда в качестве певязок в критерии (4.28) можно использовать разность коэффициентов активности по одному из компонентов, разность избыточных энергий смешения, разность концентраций, разность температур или давлений. Для несовместимых данных использование различных невязок будет приводить и к различным наборам параметров. Уравнения

$$\begin{aligned} \ln \gamma_1^{\text{расч}} &= x_2^2 \left(\Delta G + x_1 \frac{d\Delta G}{dx_1} \right); \\ \ln \gamma_2^{\text{расч}} &= x_1^2 \left(\Delta G - x_2 \frac{d\Delta G}{dx_2} \right), \end{aligned} \quad (4.44)$$

где $\Delta G = \ln \gamma_1/x_1 + \ln \gamma_2/x_2$, удовлетворяют уравнению (4.42), поэтому и рассчитанные по ним значения коэффициентов активности также будут совместимыми. Тогда несовместимые данные не будут соответствовать рассчитанным значениям.

4. Состав азеотропной смеси.
5. Коэффициенты активности при бесконечном разбавлении.
6. Теплота смешения, которая выражается через избыточную свободную энергию Гиббса как

$$h^E = T^2 \left(\frac{\partial(\Delta G/T)}{\partial T} \right)_{P, x} \quad (4.45)$$

Применение этого метода основано на том, что уравнения для γ и h^E находятся дифференцированием выражения для ΔG и, следовательно, содержат одни и те же параметры.

7. Профиль концентраций по высоте промышленной или лабораторной колонны [39].

В [40] отмечается, что использование различных невязок в (4.28) приводит к существенно различным параметрам, тем не менее воспроизведение равновесных данных во всех случаях удовлетворительное.

Рассмотренный подход к определению параметров уравнений применим к системам жидкость—жидкость, жидкость—жидкость—пар, жидкость—газ, жидкость—твердое вещество. Выбор соответствующего уравнения проводится на основе точности описания экспериментальных данных.

4.2.2. Технологический расчет единиц оборудования

Алгоритмизация этого этапа состоит в разработке математических моделей типовых процессов химической технологии. Необходимо не только качественное, но и количественное описание явлений, определяющих процесс. К настоящему времени известно большое количество алгоритмов расчета типовых процессов, отличающихся степенью детализации отдельных составляющих модели, но, по сути, предназначенных для решения систем уравнений материального и теплового балансов, нелинейность которых зависит от точности описания равновесия, химической кинетики, кинетики тепло- и массопереноса, гидродинамики потоков. Объем входной информации зависит от точности модели, однако выходная информация подавляющего большинства алгоритмов практически одинакова: профили концентраций, потоков и температур по длине (высоте) аппарата, составы конечных продуктов. Правда, соответствие результатов расчета реальным данным будет определяться тем, насколько точно в модели воспроизведены реальные условия. И все же, несмотря на обилие алгоритмов, нельзя сказать, что проблема разработки моделей (и соответственно расчета) решена — по мере углубления знаний об объекте модели непрерывно совершенствуются. Тем более что до сих пор в определенном классе процессов отсутствуют алгоритмы, обеспечивающие получение решения в любой постановке задачи и обладающие абсолютной сходимостью. Надо учесть еще, что задача в проектной постановке часто решается как задача оптимизации с использованием алгоритмов в проверочной постановке.

В связи с отсутствием «универсальных» алгоритмов расчета типовых процессов усилия многих исследователей направлены на создание таковых. Здесь можно выделить несколько основных направлений, а именно: совершенствование наиболее хорошо зарекомендовавших себя в практике расчетов алгоритмов; создание новых алгоритмов на основе объединения положительных качеств уже известных алгоритмов; разработку алгоритмов на основе принципиально новых концепций; разработку и совершенствование алгоритмов приближенного расчета, для которых проблемы сходимости и устойчивости обычно не стоят, но вопросы повышения точности остаются доминирующими.

Как уже отмечалось, технологическая схема представляет собой организованную совокупность аппаратов, выполняющих функции смешения (емкости), изменения энтальпии (тепловые аппараты), изменения давления (компрессоры, насосы, дроссели),

химического превращения (реакторы) и деления (делители потоков и аппараты выделения отдельных чистых веществ или фракций). По технической реализации эти группы элементов схемы весьма разнообразные, но в основе их математического описания лежат одинаковые закономерности (см. рис. 4.3).

Гидродинамическая структура потоков. Исходя из блочного представления математической модели элемента технологической схемы, описание явлений, характеризующих перенос и распределение субстанции по координатам и по времени и базирующихся на фундаментальных законах гидромеханики многокомпонентных многофазных систем, составляет основу будущей модели. Учет реального распределения температур, концентраций компонентов и связанных с ними свойств, например плотности, вязкости и т.д., по пространственным координатам аппарата и во времени позволяет оценивать степень достижения равновесности тепломассопереноса, химического превращения, т. е. эффективность конкретного аппарата. Описание гидродинамической структуры потоков основано на модельных представлениях о гидродинамической обстановке в аппарате, использующих ряд идеализированных типовых моделей. Аппарат такого представления достаточно развит для однофазных потоков, разработаны и методы идентификации параметров отдельных моделей применительно к реальным условиям протекания процесса. Математическое описание типовых моделей структуры потоков приведено в табл. 4.4 [41].

При анализе реальной гидродинамической структуры потоков часто используются более сложные модели, построенные на основе приведенных в табл. 4.4. К таким моделям относятся комбинированные, образованные путем соединения ячеек полного перемешивания, вытеснения, застойных зон, байпасных и рециркуляционных потоков. Определение параметров моделей структуры потоков и решения в виде передаточных функций подробно изложено в монографии [41].

Модели табл. 4.4 записаны для нестационарных условий движения потоков. Приравнивая нулю производную по времени, можно получить модели для стационарных условий. При этом существенно упрощается и соответствующее математическое описание. Так, для ячеечных моделей вместо системы дифференциальных уравнений описанием будет система нелинейных алгебраических уравнений. В общем случае весьма трудно получить аналитическое решение системы уравнений модели. Поэтому основными подходами к разработке алгоритмов решения являются аппарат передаточных функций и методы вычислительной математики. Эти методы по классам уравнений (дифференциальным в частных производных, обыкновенным дифференциальным, системам алгебраических уравнений) достаточно разработаны и обычно составляют библиотеку стандартных программ для решения задач вычислительной математики.

TFUN		DATA DICTIONARY		KWANT-M 01.01.46		11-27-85	
REPORT				МОХТИ ЛАБОРАТОРИЯ САПР		10:03:56	
						K	P I I
						Б	F I L R E D
LINE	LEVEL	NAME	FORM	SIZE	Y	%	I U T
10	02	NAME1	ASC	50	Y	90	N Y Y
20	02	CODE	ASC	3	Y	90	N Y Y
30	02	TYPEERR	ASC	1			
40	02	VALUEERR	ASC	12			
50	02	LITNUMB	ASC	3			
60	02	LITVOL	ASC	3			
70	02	LITPAGE	ASC	4			
80	02	PRESSURE	ASC	12			
90	02	NUMPOINT	ASC	5			
100	01	RG	EXPDATA				
110	02	TVECTOR	ASC	12			
120	02	XVECTOR	ASC	12			
0 ERRORS							

Рис. 5.21. Файл базы данных «Физико-химические свойства» (табличные значения свойств-зависимостей)

пятый — значения параметров моделей, описывающих неидеальность жидкой фазы). Кроме того, в каждом файле имеется ссылка на базу «Литературные источники». Ключевые поля, имеющиеся в нескольких файлах, являются связующими ссылками между файлами баз данных. С помощью этих ссылок реализуются верхние уровни вложенных связей типа «один ко многим», а также возможные сетевые связи.

База данных «Технологические схемы» также реализована в виде трех файлов: первый — файл типовых элементов, содержащий информацию о количестве входных и выходных потоков данного элемента, а также об алгоритме его расчета; второй — файл технологических схем, содержащий данные о всех типовых элементах данной схемы, а также данные, идентифицирующие потоки и их связи с элементами; третий — файл потоков, который содержит полную информацию о данном потоке схемы.

База «Литературные источники» отображена в один файл. Физическое отображение рассмотренных баз приведено на рис. 5.20—5.29.

Из сказанного следует, что адекватное отображение обобщенных схем произведено с некоторой избыточностью на уровне как записей, так и файлов. Если избыточность на уровне записей не несет потенциальной опасности (поскольку изменения в базе

TAPR		DATA DICTIONARY		KWAFT-M 01.01.46		11-27-85	
REPORT				МХТИ ЛАБОРАТОРИЯ САПР		10:04:25	
						K	P I I
						E	P I L R N D
LINE	LEVEL	NAME	FORM	SIZE	Y	%	I U T
10	02	NAME1	ASC	50	Y	90	N Y Y
20	02	CODPROP	ASC	3	Y	90	N N Y
30	02	TYPEAPR	ASC	2	Y	90	N N Y
40	02	LITNUMB	ASC	3			
50	02	LITVOL	ASC	3			
60	02	LITPAGE	ASC	4			
70	02	TYPEERR	ASC	1			
80	02	VALERR	ASC	12			
90	02	LOWBOUND	ASC	12			
100	02	HIGBOUND	ASC	12			
110	02	PRESSURE	ASC	12			
120	02	NUMARRAY	ASC	2			
130	01	RG DATA					
140	02	VECTOR	ASC	12			
O ERROES							

Рис. 5.22. Файл базы данных «Физико-химические свойства» (коэффициенты аппроксимирующих полиномов свойств-зависимостей)

ведутся по файлам, то будут скорректированы и все поля внутри файла), то избыточность на уровне файла может привести к нарушению адекватности представления данных. В самом деле, если коррекция значений производится только в одном файле, то будет потеряна связь с другими файлами при изменении значения внешнего ключа. Поэтому при эксплуатации баз данных необходимо внимательно следить за изменением ключевых полей, являющихся ссылками на другие файлы.

Если при физическом отображении информационной модели базы разработчик встречается со значительными трудностями, то необходимо либо упростить схему (что часто нежелательно), либо выбрать СУБД, поддерживающую нужные структуры данных. Процесс проектирования баз является ответственным этапом, поскольку именно успех или неуспех в проектировании определяет жизнеспособность БД и, следовательно, самой САПР. Под жизнеспособностью понимается возможность расширения БД как в количественном, так и в качественном плане, а эта способность накладывается именно на стадии проектирования.

Таблица 4.4

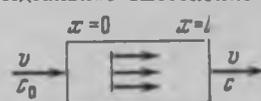
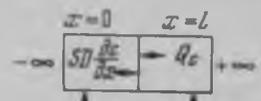
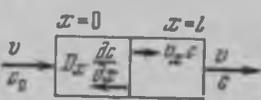
Структурная схема модели	Математическое описание	Начальные и граничные условия	Область применения
<p>Идеальное вытеснение</p>  <p>Идеальное перемешивание</p> 	$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = 0$ $V \frac{\partial c}{\partial t} = Q(c_0 - c)$	$c(x, 0) = c_0;$ $c(0, t) = c_0(t);$ $0 < x < l; t > 0$ $c_0 = c_{вх} \delta(0);$ $c_0 = c_0(t) - \text{произвольная функция}$	<p>Трубчатые аппараты с отношением длины к диаметру выше 20</p> <p>Цилиндрические аппараты интенсивного перемешивания со сферическим дном и с отражательными перегородками</p>
<p>Однопараметрическая диффузионная</p>  <p>Двухпараметрическая диффузионная</p> 	$D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\partial c}{\partial t}$ $D_x \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} + D_r \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial c}{\partial r} \right) = \frac{\partial c}{\partial t};$ $c = c(x, r, t)$	<p>Длина аппарата $0 < x < +\infty$; длина экспериментальной секции $0 < x < l$; $c(x, 0) = 0$ ($-\infty < x < +\infty$); $c_0(0, t) = c_{вх} \delta(0) (t \geq 0)$</p> <p>Длина аппарата $0 < x < l$; радиус по сечению аппарата $0 < r < R$; $c(x, r, 0) = 0$; $c(0, 0, t) = c_0 \delta(0)$; $v c(0, r, t) - D_x \frac{\partial c(0, r, t)}{\partial x} = 0$; $\frac{\partial c(l, r, t)}{\partial x} = 0$; $\frac{\partial c}{\partial r}(x, r, t)$</p>	<p>Трубчатые аппараты; аппараты колонного типа с насадкой и без насадки при осевом расщеплении вещества</p> <p>Трубчатые аппараты; аппараты колонного типа с небольшим отношением длины к диаметру с большой поперечной неравномерностью скоростей потоков</p>

Таблица 4.4 (продолжение)

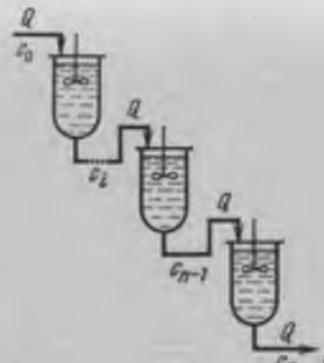
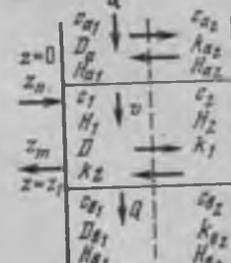
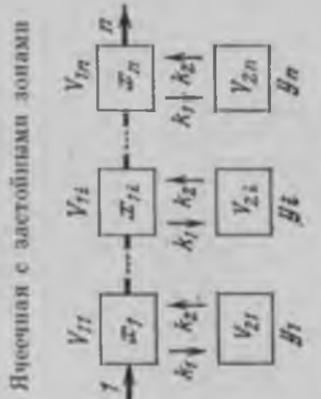
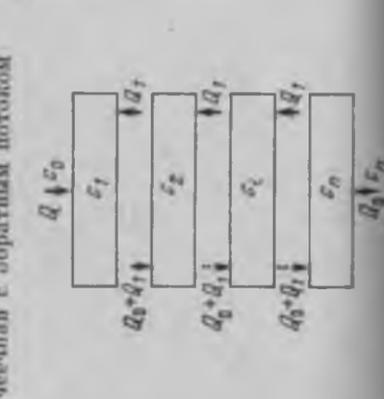
Структурная схема модели	Математическое описание	Начальные и граничные условия	Область применения
<p>Ячеичная</p>  <p>Диффузионная с застойными зонами</p> 	$\frac{\partial c_i}{\partial t} = \frac{Q}{V_i} (c_{i-1} - c_i);$ $i = 1, 2, \dots, n$ $\text{При } k_1 = k_2 = k$ $-Q \frac{\partial c_1}{\partial x} + SH_1 D \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - kS(c_1 - c_2) = SH_1 \frac{\partial c_1}{\partial t};$ $k(c_1 - c_2) = H_2 \frac{\partial c_2}{\partial t};$ <p>при $k_1 \neq k_2$</p> $-Q \frac{\partial c_1}{\partial x} + SH_1 \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} - S(k_1 c_1 - k_2 c_2) = SH_1 \frac{\partial c_1}{\partial t};$ $k_1 c_1 - k_2 c_2 = H_2 \frac{\partial c_2}{\partial t}$	$c_0(0) = c_0 \delta(0);$ $V_1 = V_2 = \dots = V_n = V$ <p>Определяются типом аппарата</p>	<p>Каскады реакторов с мешалками; тарельчатые колонны; аппараты с псевдооживленными слоями; насадочные колонны</p> <p>Потоки в зернистой среде, в насадке, на тарелке аппарата, в которых наблюдаются относительно неподвижные объемы жидкости и газа</p>

Таблица 4.4 (окончание)

Структурная схема модели	Математическое описание	Начальные и граничные условия	Область применения
<p>Идеальная с застойными зонами</p> 	$V_{1t} \frac{dx_1}{dt} = Qx_{t-1} - Qx_1 + V_1 k_1 x_1;$ $V_{2t} \frac{dx_2}{dt} = V_1 k_1 x_1 - V_2 k_2 x_2$	<p>При $t = 0$</p> $x_1(0) = x_{ax} \delta(0);$ $x_2(0) = \dots = x_n(0) = 0;$ $y_1(0) = y_2(0) = \dots = 0;$	То же
<p>Посетил с обратным потоком</p> 	$\frac{\Delta V}{Q_0} \frac{d\epsilon_1}{dt} + (1 + f) \epsilon_1 - f \epsilon_2 = \epsilon_0;$ $\frac{\Delta V}{Q_0} \frac{d\epsilon_2}{dt} + (1 + 2f) \epsilon_2 - f \epsilon_3 =$ $= (1 + f) \epsilon_1;$ <p>.....</p> $\frac{\Delta V}{Q_0} \frac{d\epsilon_l}{dt} + (1 + 2l) \epsilon_l - f \epsilon_{l+1} =$ $= (1 + f) \epsilon_{l-1};$ $\frac{\Delta V}{Q_0} \frac{d\epsilon_n}{dt} + (1 + f) \epsilon_n =$ $= (1 + f) \epsilon_{n-1}$	<p>При $t = 0$</p> $\epsilon_0 = \epsilon_0 \delta(0); \epsilon_1 = \epsilon_2 = \dots$ $\dots = \epsilon_n = 0$	<p>Аппараты, где наблюдателей заброс вещества в сторону, обратную направлению основного потока (тарельчатые, наследочные аппараты)</p>

Модели структуры потоков являются основой расчета гидродинамических процессов в аппаратах, выполняющих функции смесителей потоков различных количеств и составов. Для стационарных условий математическое описание смесителя емкостного типа состоит из уравнений материального и теплового балансов:

$$G = \sum_i G_i; \quad Gx = \sum_i G_i x_i \quad (4.46)$$

$$Gtc_p = \sum_i G_i t_i c_{pi}, \quad (4.47)$$

где G — количество выходного потока; x — состав выходного потока; c_p — теплоемкость; t — температура; G_i , x_i — количества и состав входных потоков. Для учета теплоты смешения потоков необходимо воспользоваться уравнением (4.45). На основании уравнений (4.46), (4.47) рассчитываются концентрации, количество и температура выходного потока. Заметим, что температура определяется итерационно по уравнению теплового баланса.

При переносе потока вещества в химическом аппарате происходит изменение его концентрации, температуры за счет химических реакций, тепло- и массопереноса. Поэтому при переходе к моделям расчета соответствующих аппаратов необходимо уравнения, описывающие гидродинамическую структуру потоков, дополнить членами, учитывающими источники и стоки массы и тепла потоков (в зависимости от того, образуется или расходуется масса или энергия), т. е. учитывать соответственно диффузионные, химические, термокинетические составляющие.

Изменение энтальпии (теплообменные аппараты). Разработка математической модели теплообменного аппарата осложняется спецификой конструкционного оформления и назначения, как-то: родом теплоносителей, способом интенсификации процесса теплообмена, гидродинамическим режимом потоков, характером передачи тепла, конфигурацией и компоновкой поверхностей теплообмена, количеством ходов и направлением потоков тепло- и хладагентов, материалом аппарата и т. д. В основе методов расчета теплообменников лежит использование соответствующей модели структуры потока (см. табл. 4.4) с учетом источника тепла, описываемого уравнением теплопередачи

$$dQ = K (T^* - T) dF, \quad (4.48)$$

где Q — скорость теплопередачи; T^* , T — температуры обменивающихся теплом потоков; K — коэффициент теплопередачи; F — поверхность теплообмена. При изменении агрегатного состояния обменивающихся потоков необходимо учитывать теплоту фазового перехода, являющуюся функцией состояния потоков.

Гидродинамическая структура в аппарате (по каждому из потоков) создается его конфигурацией (наличием перегородок и их

расстановкой, диаметром аппарата, числом труб и числом ходов), скоростью течения потоков. Поэтому модели структуры обменивающихся потоков могут различаться (например, для теплообменников типа смешение—смешение, смешение—вытеснение и т. п.). Коэффициенты теплоотдачи обычно рассчитываются по критериальным соотношениям для различных режимов течения потоков тепло- и хладагента. При сложной конфигурации аппарата обычно используется представление его в виде ряда зон различной структуры (или с комбинированной моделью потоков), а общая поверхность определяется как сумма поверхностей отдельных зон. Математическое описание типовых моделей теплообменников для стационарных условий приведено в табл. 4.5 [1, 42].

В более общем случае при расчете теплообменников необходимо приведенные уравнения дополнить уравнениями, характеризующими изменение объемной скорости потоков по длине аппарата, изменение теплоемкости в функции температуры, зависимость коэффициента теплопередачи от объемных расходов. Аналогично необходимо учитывать теплоту фазовых переходов при конденсации или испарения теплоносителя или хладагента. Алгоритмы расчета теплообменной аппаратуры различных типов изложены в монографии [43].

Наряду с теплообменной аппаратурой в технологических схемах широко используются испарители и конденсаторы многокомпонентных смесей. Математическим описанием таких аппаратов являются уравнения теплового баланса и материального баланса:

$$F = L + V; \quad Fx_{Fi} = Lx_i + Vy_i; \quad (4.49)$$

$$Fc_{pL}T^0 - Lc_{pL}T + F_{\tau}K(T_{\tau} - T) - V(\lambda + c_{pV}T) = 0, \quad (4.50)$$

дополненные уравнениями для расчета фазового равновесия (4.22), (4.23) и стехиометрическими соотношениями. Здесь F , x_F — количество и состав подаваемого в аппарат сырья; L и V — количества образовавшихся жидкой и паровой фаз состава x_i и y_i ; T_{τ} — температура теплоносителя. Уравнения (4.49) и (4.50) записаны для моделей идеального смешения. Обычно расчет испарителя ведется при заданном давлении в системе, и необходимо определить составы, количества фаз и температуру. Алгоритм расчета состоит в определении одного из потоков при некоторой температуре, уточняемой в результате итерационного решения уравнения

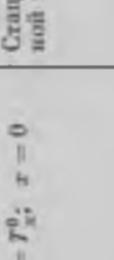
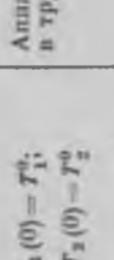
$$f(T) = 1 - \sum_i \frac{Fx_{Fi}}{F - V(1 - b_i)} = 0, \quad (4.51)$$

полученного в результате подстановки уравнений (4.49) в стехиометрическое соотношение. Здесь k_i — константа фазового равновесия, равная $p_i^0(T) \gamma_i / (P\phi_i)$. Решение уравнения (4.51) может

Таблица 4.5

Модель	Математическое описание	Начальные и граничные условия	Область применения
Идеальное вытеснение	$v \epsilon_p \frac{dT}{dx} = \frac{KF}{l_p} (T^* - T)$	$T(0) = T_n \quad (0 \leq x \leq l_p);$ $v(x), \epsilon_p(x) = \text{const}$	Трубчатые аппараты с отношением длины к диаметру свыше 20
Идеальное смешение	$v \epsilon_p (T^* - T^b) =$ $\frac{KF}{l_p} \int_0^l (T_x(l) - T^b) dl$ <p>или</p> $v \epsilon_p (T^* - T^b) +$ $+ v \epsilon_p \mu \epsilon (T_n^* - T_n^b) = 0$	Примечание: для теплообменника с режимом вытеснения для хладоагента (теплоносителя). Уравнение теплового баланса	Цилиндрические аппараты с мешалками и отражательными перегородками
Одномерная симметричная диффузионная	$-\epsilon_p D_L \frac{d^2 T}{dx^2} + \epsilon_p v \frac{dT}{dx} =$ $= \frac{KF}{l_p} (T^* - T)$	$T = T^* \quad x = 0;$ $\frac{dT}{dx} = 0 \quad x = L$	Трубчатые аппараты с большой поперечной неравномерностью скоростей потоков
Несечная	$v \epsilon_p (T_l - T_{l-1}) = \frac{KF}{n l_p} \times$ $\times (T^* - T_l);$ $l = 1, 2, \dots, n$	$T_n = T_n^*;$ $T_0 = T_n$	

Таблица 4.5 (окончание)

Модель	Математическое описание	Начальные и граничные условия	Область применения
<p>Прямоточный теплообменник типа смешение-смещение</p> 	$v_p c_p (T^0 - T^k) =$ $= KF (T^k - T_x^k);$ $v_x c_{px} (T_x^0 - T_x^k) =$ $= KF (T^k - T_x^k)$	$T_x = T_x^0; \quad x = 0$	<p>Стационарный погружной теплообменник</p>
<p>Теплообменник типа смещение-вытеснение</p> 	$v_x c_{px} \frac{dT_x}{dx} = \frac{KF}{l_p} (T^k - T_x);$ $v_p (T^0 - T^k) + c_{px} (T_x^0 - T_x^k) =$ $= 0$	$T_1(0) = T_1^0;$ $T_2(0) = T_2^0$ $T_1(0) = T_1;$ $T_2(l_p) = T_2$	<p>Аппараты типа «труба в трубе»</p>
<p>Прямоточный теплообменник</p> 	$v_p c_p \frac{dT_p}{dx} = \frac{KF}{l_p} (T_x - T_p);$ $v_x c_{px} \frac{dT_x}{dx} = \frac{KF}{l_p} (T_x - T_p)$	$v_p c_p \frac{dT_p}{dx} = \frac{KF}{l_p} (T_2 - T_1);$ $v_x c_{px} \frac{dT_x}{dx} = \frac{KF}{l_p} (T_3 - T_1)$	<p>Противоточный теплообменник</p>

быть выполнено одним из методов решения уравнений с одной неизвестной.

Массообменные процессы. Эта группа процессов отличается значительной сложностью по сравнению с предыдущими и соответственно большим числом моделей для их расчета. Массообменный процесс в большинстве случаев (ректификация, экстракция, абсорбция, кристаллизация) является системой, включающей как необходимые другие аппараты (например, теплообменники, конденсаторы, декантаторы и т. п.). Поэтому и математические модели как для описания, так и для алгоритмизации являются более сложными. Рассмотренные ранее модели структуры потоков и теплообмена могут использоваться при описании массообменных процессов на ступени разделения (тарельчатые колонны) и в слое насадки (насадочные колонны). При описании массообменного процесса уравнения гидродинамической структуры потоков фаз (см. табл. 4.4) должны быть дополнены членом, учитывающим массоперенос компонента через поверхность раздела фаз, например, в матричном выражении:

$$M = k_{ov}(X^* - X), \quad (4.52)$$

где k_{ov} — матрица коэффициентов массопередачи, отнесенных к паровой фазе; X^* и X — вектор-столбцы равновесных концентраций и концентраций компонентов в рассматриваемой фазе. Массопередача обычно сопровождается переносом тепла за счет разности скрытых теплот испарения компонентов и тепловых эффектов при смешении неравновесных потоков. Последние можно оценить через теплоты фазового перехода при испарении и по уравнению (4.45) соответственно. Эти члены должны быть включены в соответствующие уравнения теплового баланса. Для процессов, протекающих в изотермических условиях (экстракции, абсорбции, мембранного разделения), или при равенстве мольных теплот испарения компонентов обычно тепловой баланс процесса не рассматривается, и тогда потоки контактирующих фаз принимаются неизменными по высоте секций.

В случае тарельчатых (полочных) аппаратов принимаются модели структуры потоков для каждой ступени и для межтарельчатого пространства, а для насадочных аппаратов модель принимается по всей его длине (высоте). Рассмотрим в качестве примера связь между гидродинамической структурой потоков и эффективностью в тарельчатых ректификационных колоннах. Для ректификационной колонны с произвольным количеством вводов питания и боковых отборов, имеющей N тарелок и снабженной кипятильником и дефлегматором, можно записать следующую систему уравнений (рис. 4.10).

Уравнение общего материального баланса:

$$\sum_1^P F_i - D - W - \sum_1^m S_{Li} - \sum_1^k S_{Vi} = 0, \quad (4.53)$$

где F — поток питания; D — поток дистиллята; W — поток кубового продукта; S_L — жидкостной поток бокового отбора; S_V — паровой поток бокового отбора; индексы p, m, k — количества потоков питания и боковых отборов соответственно.

Уравнение материального баланса тарелки:

$$F_j + L_{j+1} + V_{j-1} - (L_j + S_{Lj}) - (V_j + S_{Vj}) = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (4.54)$$

Уравнение покомпонентного материального баланса тарелки:

$$F_j x_{F_{ij}} - L_{j+1} x_{i, j+1} + V_{j-1} y_{i, j-1} - (L_j + S_{Lj}) x_{ij} - (V_j + S_{Vj}) y_{ij} = 0, \quad (4.55)$$

где x — состав жидкости; y — состав пара.

Уравнение теплового баланса колонны:

$$\sum_i^n L_{Fi} h_{Fi} + \sum_i^m V_{Fi} H_{Fi} - D h_D - W h_W - \sum_i^m S_{Li} h_i - \sum_i^k S_{Vi} H_i + Q_W - Q_D = 0, \quad (4.56)$$

где H — энтальпия пара; h — энтальпия жидкости; Q_W — нагрузка (тепловая) на кипятильник; Q_D — тепловая нагрузка на конденсатор.

Уравнение общего покомпонентного материального баланса:

$$\sum_i^n F_i x_{F_{ij}} - D x_{Dj} - W x_{Wj} - \sum_i^m S_{Li} x_{ij} - \sum_i^k S_{Vi} y_{ij} = 0. \quad (4.57)$$

Уравнение теплового баланса тарелки:

$$L_{Fj} h_{Fj} + V_{Fj} H_{Fj} + L_{j+1} h_{j+1} - V_{j-1} H_{j-1} - (L_j + S_{Lj}) h_j - (V_j + S_{Vj}) H_j = 0. \quad (4.58)$$

Концентрации компонентов в паровой и жидкой фазах на каждой тарелке связаны равновесным соотношением (4.22) и стехиометрическими соотношениями

$$\sum_i x_{ij} = \sum_i y_{ij} = 1.$$

Если принять, что степень достижения равновесия на тарелке характеризуется в терминах КПД Мерффи, то для состава пара, покидающего тарелку, можно записать

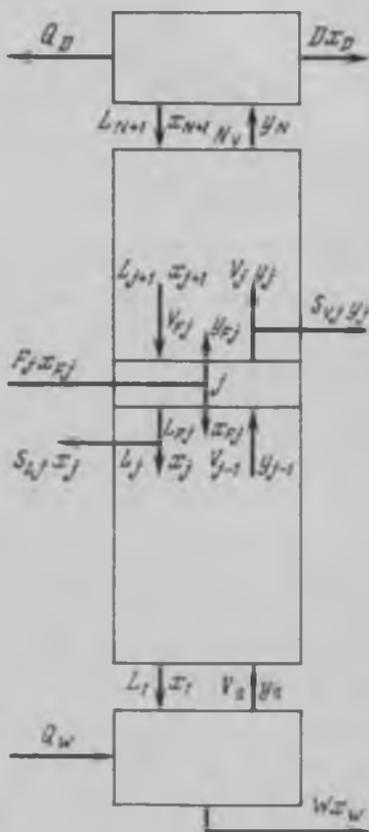
$$y_{ij} = (1 - E_{ij}) y_{ij} + E_{ij} y_{ij}^*, \quad (4.59)$$

или [44]

$$y_{ij} = \sum_i^j y_{i1}^* E_{ii} \prod_{i=i+1}^j (1 - E_{ii}), \quad (4.60)$$

где E_{ij} — КПД Мерффи.

Рис. 4.10. Схема потоков в ректификационной колонне



Для кипятыльника уравнение баланса запишется в виде

$$Lx_{i1} - Wx_{w1} - Vy_{w1}^* = 0, \quad (4.61)$$

для полного конденсатора — в виде

$$Vy_{D1} - (L + D)x_{D1} = 0. \quad (4.62)$$

В конкретном алгоритме расчета колонны отдельные уравнения могут не использоваться или объединяться, так же как и для секций колонны, экстракторов или абсорберов без обратных потоков (без флегмирования) отпадает необходимость в конденсаторах и испарителях.

Гидродинамическая обстановка на тарелке (или слое насадки) существенно влияет на эффективность массопереноса, на степень достижения равновесных значений концентраций фаз. Чем ниже эффективность тарелки, тем, очевидно, необходимо большее время пребывания фаз в контакте или большая поверхность контакта. При движении жидкости вдоль контактного элемента наблюдается неравномерность массопереноса, обусловленная различными градиентами концентраций (движущей силы), различной высотой слоя жидкости, обратным забросом фаз, различной гидродинамической обстановкой и т. д. Поэтому целесообразно воспользоваться для оценки эффективности массопереноса характеристиками локальных объемов массообменного пространства, в пределах которых может быть принята однородная гидродинамическая структура потоков, и определять эффективность контактной ступени интегрально. Такой характеристикой эффективности массопереноса является локальный КПД в форме уравнения (4.59), записанный для многокомпонентной смеси в матричном виде как [1, 45, 46]

$$\eta^j = \eta^{j-1} + E^j (\eta^{*j} - \eta^{j-1}), \quad (4.63)$$

где E — матрица локальной эффективности контакта фаз размерности $(k - 1) \times (k - 1)$ (k — число компонентов смеси), опреде-

ляемая выражением

$$E^j = I - \exp \left\{ -K_{ov}^j \frac{HS_{\tau}}{\nu} \right\}, \quad (4.64)$$

где H — высота слоя барботажа; S_{τ} — площадь, для которой определяется матрица локальной эффективности; ν — количество пара, барботирующего через эту площадь; K_{ov} — матрица коэффициентов массоотдачи, определяемая через матрицы частных коэффициентов массоотдачи при допущении линейной равновесной зависимости в пределах массообменного пространства следующим образом:

$$K_{ov} = K_{\nu}^{-1} + MK_{x}^{-1}, \quad (4.65)$$

где

$$m_{ij} = \frac{y_j^*}{x_j} (\delta_{ij} - y_i) + y_i^* \frac{y_j^*}{x_k}; \quad (4.66)$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j; \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

Матрица локальной эффективности позволяет учесть специфические особенности многокомпонентного массопереноса. Вместе с тем элементы матрицы подвержены значительно меньшим изменениям в пределах тарелки. В табл. 4.6 приведены соотношения для расчета эффективности тарелки в зависимости от модели структуры потоков с помощью матрицы локальной эффективности.

Выражения для матриц эффективности более сложных моделей можно найти в [45, 46].

Для насадочных аппаратов более правомерно применение моделей идеального вытеснения и диффузионной. В случае принятия моделей вытеснения по обем фазам для секции насадки можно записать уравнения

$$V \frac{dy}{dt} = SK_{ov}(y^* - y); \quad (4.67)$$

$$L \frac{dx}{dt} = SK_{ov}(y^* - y), \quad (4.68)$$

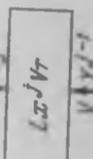
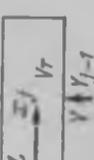
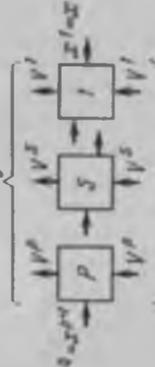
которые должны интегрироваться при граничных условиях

$$y(0) = y^0; \quad x(0) = x^0; \quad 0 \leq l \leq H. \quad (4.69)$$

При наличии продольного перемешивания, например, по паровой фазе однопараметрическое уравнение диффузионной модели запишется в виде

$$\frac{d}{Pe_L} \frac{d^2x}{dl^2} + \frac{dx}{dt} = \frac{S}{L} K_{ov}(y^* - y) \quad (4.70)$$

Таблица 4.6

Структурная схема модели (по жидкости)	Математическое описание	Область применения
<p>Идеальное перемешивание</p> 	$E_c^j = I - \exp\left(-K_{0v}^j \frac{V_T}{V}\right)$	<p>По паровому потоку — модель вытеснения. Применяется при высоких скоростях пара</p>
<p>Идеальное перемешивание</p> 	$E^j = \frac{L}{V} \left(\exp\left(\frac{V}{L} E_c^j M\right) - I \right) M^{-1}$	<p>По паровой фазе — модель вытеснения. Применяется при высоких скоростях жидкости</p>
<p>Ячеечная модель</p> 	$E^j = \sum_{s=1}^n \frac{V^s}{V} \prod_{l=1}^{s-1} (I + A^{(p+1-l)}) E^l;$ $A^p = \frac{V^p}{V} E_c^p M$	<p>Равномерное распределение парового потока по ячейкам. Применяется для колонн большого диаметра при равномерном течении жидкости</p>

с граничными условиями вида

$$x(H^+) = x(H^-) + \frac{D}{Pe_L} \frac{dx(H^-)}{dl}; \quad \frac{dx(0)}{dl} = 0, \quad (4.71)$$

где D — диаметр насадки.

Основная трудность расчета массообменных процессов заключается в обеспечении решения систем уравнений материального и теплового балансов, причем сложности в обеспечении сходимости решения обычно возрастают при разделении смесей с сильно неидеальными свойствами.

По способу организации вычислений все методы можно разделить на две группы: потарелочные (от ступени к ступени) и матричные. В методах первой группы расчет выполняется последовательно, начиная от одного из концов колонны к другому с последующей проверкой выполнения уравнений материального и теплового балансов. В качестве критерия обычно выбирается выполнение уравнений баланса, равенство суммы концентраций компонентов по высоте аппарата единице в мольном измерении или равенство концентраций, температур или потоков по высоте аппарата (с заданной точностью) в двух последующих приближениях. После очередного расчета уточняется начальное приближение и вычисления повторяются. В методах второй группы по каждому из компонентов смеси (или по всем компонентам) записывается система уравнений и решение осуществляется матричными методами. Поскольку начальное приближение в общем случае произвольно, то после выполнения очередной итерации производится коррекция значения искомого переменных.

По мере совершенствования средств вычислительной техники и снижения ограничений по занимаемой памяти методы второй группы находят все более широкое распространение. Основной причиной этого является меньшая склонность методов второй группы к накоплению ошибок округления и соответственно большая устойчивость вычислительных схем при расчете колонн с несколькими вводами и боковыми отборами. К тому же при расчете комплексов аппаратов, по существу, снимается проблема задания топологии системы — все связи между колоннами отражены соответствующими коэффициентами в матрице системы уравнений баланса. Следует заметить, что матрицы коэффициентов систем уравнений баланса многостадийных процессов являются неплотными. Поэтому применение специальных методов хранения данных позволяет свести к минимуму объем занимаемой памяти.

Матричные методы решения систем нелинейных уравнений можно разделить на две группы по способу линеаризации. К первым относятся методы, в которых линейность достигается за счет использования численных значений параметров, определяющих нелинейность, с предыдущих итераций. Являясь методами нулевого порядка, они в ряде случаев обладают слишком медленной сходимостью или вообще не обеспечивают решения.

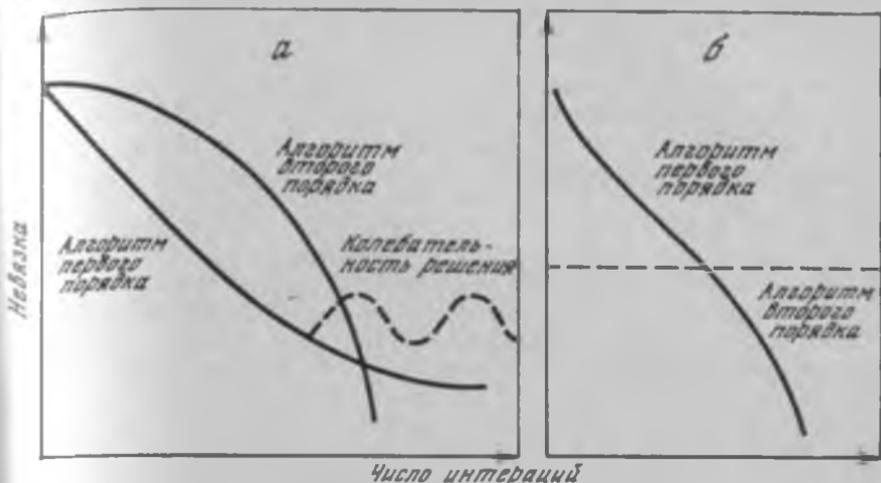


Рис. 4.11. Характер сходимости решения для алгоритмов первого и второго порядков (а) и их объединения (б)

Другим способом линеаризации является разложение функции (уравнения баланса) в ряд Тейлора до членов первого или второго порядка. Полученная система уравнений решается методом Ньютона—Рафсона, обладающим квадратичной сходимостью. Методам этой группы свойственна высокая чувствительность к начальному приближению.

Особое место среди других занимает метод релаксации, заключающийся в том, что стационарное решение получается в результате решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений материального и теплового балансов. Метод обладает устойчивой сходимостью независимо от сложности задачи, однако по мере приближения к решению скорость сходимости очень низкая. В конкретных случаях иногда удается, исходя из специфики решаемой задачи, все-таки ускорить сходимость [47].

Ускорение и обеспечение сходимости решения систем уравнений баланса производится часто путем введения форсирующих процедур, основанных на особенностях решаемых задач или путем объединения положительных сторон методов различных групп. Так, объединение методов линеаризации и релаксации для получения «хорошего» начального приближения позволяет решать более широкий класс задач при высокой скорости сходимости. На рис. 4.11 приведено характерное изменение невязки (например, по материальному балансу) для методов со скоростью сходимости первого и второго порядков в зависимости от числа итераций и изменение последней при объединении этих методов [48].

Химическое превращение. В общем случае при разработке математического описания химического реактора необходимо учи-

тывать термокинетические, диффузионные и химические эффекты. Соответственно в уравнение гидродинамической модели структуры потоков включаются выражения, характеризующие источники вещества и тепла. Собственно источником вещества является химическое превращение, и его интенсивность будет пропорциональна скорости образования продуктов реакции [42]:

$$R = Ar, \quad (4.72)$$

где A — матрица стехиометрических коэффициентов элементарных стадий сложной химической реакции; r — вектор-столбец скоростей элементарных стадий. Источником тепла является тепловой эффект элементарных реакций, протекающих в системе, и его интенсивность пропорциональна сумме этих эффектов:

$$Q_r = \sum_j a_{ij} q_j r_j, \quad (4.73)$$

где q_j — удельный тепловой эффект элементарной стадии реакции; a_{ij} — стехиометрический коэффициент образующегося на этой стадии продукта реакции.

При наличии теплового эффекта реакции, очевидно, необходимо обеспечить подвод (съем) тепла за счет внешнего теплоносителя (хладоагента). Соответственно математическое описание должно включать и выражение (4.48) в уравнении теплового баланса. И, наконец, для реакций, протекающих в системе из двух (и более) фаз, необходимо учитывать массоперенос через границу раздела фаз в форме выражения (4.52). Таким образом, в зависимости от физико-химической природы реагентов, их характерного состояния, типа реакции (эндо- или экзотермическая) одной и той же модели структуры потоков будут соответствовать различные математические описания конкретных реакторов.

В качестве примера рассмотрим формирование математического описания гомогенного трубчатого реактора для стационарных условий протекания реакций. Реакции протекают с тепловым эффектом, следовательно, необходим теплоотвод. Описание будет содержать уравнения покомпонентного баланса в форме

$$v\rho \frac{dx}{dt} = sAr \quad (4.74)$$

с граничными условиями

$$x(0) = x^0;$$

уравнение теплового баланса реагирующей смеси

$$vc_r \frac{dT}{dt} = Q_r + \frac{KFr}{L_r} (T - T_c) \quad (4.75)$$

с граничными условиями:

$$T(0) = T^0;$$

уравнение теплового баланса теплоносителя

$$v_t c_{\text{тп}} \frac{dT_{\text{т}}}{dl} = \frac{KF_{\text{т}}}{L_{\text{т}}} (T - T_{\text{т}}) \quad (4.76)$$

с граничными условиями

$$T_{\text{т}}(0) = T_{\text{т}}^0.$$

Здесь ρ — плотность потока; индекс т относится к теплоносителю.

Аналогичным образом можно записать для реактора соответствующей конструкции математическое описание на основе гидродинамической модели смешения, ячеечной, диффузионной и т. д. [11, 49]. В табл. 4.7 приведены математические описания каталитических псевдогомогенных (квазигомогенных) и гетерогенных реакторов [42]. Как и ранее, описание включает уравнения материального и теплового баланса с учетом источников (стоков) вещества и энергии в форме соотношений (4.48), (4.52), (4.72) и (4.73).

Биохимические процессы. Эта группа процессов представляет собой наиболее сложную стохастико-детерминированную систему, осложненную биологической кинетикой, т. е. описанием явлений развития популяций живых клеток. Поэтому математическое описание должно быть дополнено соотношениями, определяющими кинетику их роста. Поскольку в настоящее время отсутствует достоверное описание внутриклеточных явлений, то при моделировании биохимических процессов чаще всего используются обобщенные кинетические модели роста популяции микроорганизмов, формируемые на основе приближенных моделей роста единичной клетки, транспортирования и превращения субстрата в клетке, физиолого-биохимической или возрастной модели клеток [1, 50].

Кинетическая модель характеризует скорость развития общей численности популяций R , как функции комплекса параметров внешней среды z (концентрации субстрата и продуктов метаболизма, состава минерального питания, температуры, pH и др.) и вектора параметров модели θ :

$$\frac{dx}{dt} = \sum_{i=1}^n R_i(x, z, \theta). \quad (4.77)$$

С позиций системного анализа глубина разработки кинетической модели может быть определена рассмотрением кинетики роста популяций с учетом обобщенных ферментативных реакций, возрастной неоднородности клеточной популяции и физиолого-биохимической структуры популяции на нижнем уровне с переходом на базе этого к моделям роста клеток и образования продукта, утилизации субстрата. Рост и развитие микробных клеток в процессе их культивирования происходит под воздействием большого числа факторов и прежде всего факторов, определяющих условия жизне-

Таблица 4.7

Модель реактора	Гомогенный реактор	Гетерогенный реактор
Вытеснение	<p>Вытеснение по подвижной фазе. Материальный баланс по i-му компоненту:</p> $v \frac{dc_i}{dl} = R_i(c, T), \quad i = 1, 2, \dots, n$ <p>Тепловой баланс:</p> $v \rho c_p \frac{dT}{dl} = Q_r + 4 \frac{\alpha}{d} (T - T_{ст})$ <p>Начальные условия:</p> $C(0) = C^0, \quad T(0) = T^0$ <p>Покомпонентный материальный баланс:</p> $e D_{L \text{эф}} \frac{d^2 c_i}{dl^2} - v \frac{dc_i}{dl} - R = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$	<p>Межфазовые градиенты по теплу и веществу. Покомпонентный материальный баланс:</p> $v \frac{dc_i}{dl} = K_g(c_i - c_i^*), \quad K_g(c_i - c_i^*) = R(c^*, T), \quad i = 1, 2, \dots, n$ <p>Тепловой баланс:</p> $v \rho c_p \frac{dT}{dl} = \alpha a (T - T^*), \quad \alpha a (T - T^*) = Q_r$ <p>Начальные условия:</p> $C(0) = C^0, \quad T(0) = T^0$ <p>Покомпонентный материальный баланс:</p> $-D_L \frac{d^2 c_i}{dl^2} + v \frac{dc_i}{dl} + K_g a (c_i - c_i^*) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$
Однопараметрическая диффузионная модель	<p>Тепловой баланс:</p> $\lambda_{L \text{эф}} \frac{d^2 T}{dl^2} - v \rho c_p \frac{dT}{dl} + Q_r - 4 \frac{\alpha}{d} (T - T_{ст}) = 0$ <p>Граничные условия:</p> $l = 0, \quad v(c_i^0 - c_i) = -e D_{L \text{эф}} \frac{dc_i}{dl}$ $l = L, \quad v \rho c_p (T^0 - T) = -\lambda_{L \text{эф}} \frac{dT}{dl}$	<p>Тепловой баланс:</p> $-\lambda_L \frac{d^2 T}{dl^2} + v \rho c_p \frac{dT}{dl} + \alpha a (T - T^*) = 0, \quad \alpha a (T - T^*) + Q_r = 0$ <p>Граничные условия:</p> $l = 0, \quad -D_L \frac{dc_i}{dl} = v(c_i^0 - c_i), \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad \lambda_L \frac{dT}{dl} = v \rho c_p (T^0 - T); \quad l = L, \quad \frac{dc_i}{dl} = 0, \quad \frac{dT}{dl} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$

Таблица 4.7 (продолжение)

Модель реактора	Гомогенный реактор	Гетерогенный реактор
Двухпараметрическая диффузионная модель	<p>Покомпонентный материальный баланс:</p> $e D_{L \text{эф}} \left(\frac{\partial^2 c_i}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial c_i}{\partial r} \right) - v \frac{dc_i}{dl} - R_i = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n$ <p>Тепловой баланс:</p> $\lambda_{r \text{эф}} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) - v \rho c_p \frac{\partial T}{\partial l} - Q_r = 0$ <p>Граничные условия:</p> $l = 0, \quad c_i = c_i^0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad T = T^0;$ $r = 0, \quad \frac{\partial c_i}{\partial r} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad \frac{\partial T}{\partial r} = 0;$ $r = R, \quad \frac{\partial c_i}{\partial r} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n,$ $\frac{\partial T}{\partial r} = -\frac{\alpha}{\lambda_{r \text{эф}}} (T - T_{ст})$	<p>Покомпонентный материальный баланс:</p> $-D_L \frac{\partial^2 c_i}{\partial l^2} + v \frac{\partial c_i}{\partial l} + K_g a (c_i - c_i^0) = 0,$ $D_{\text{эф}} \left(\frac{\partial^2 c_i^*}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c_i^*}{\partial r} \right) - R_i(c^*, T^*), \quad i = 1, 2, \dots, n$ <p>Тепловой баланс:</p> $-\lambda_r \frac{d^2 T}{dl^2} + v \rho c_p \frac{dT}{dl} + \alpha' a (T - T^*) = 0,$ $\lambda_{\text{эф}} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial T}{\partial r} \right) + Q_r(c^*, T^*) = 0$ <p>Граничные условия:</p> $l = 0, \quad -D_L \frac{dc_i}{dl} = v(c_i - c_i^0), \quad i = 1, 2, \dots, n,$ $-\lambda \frac{dT}{dl} = v \rho c_p (T^0 - T);$ $l = L, \quad \frac{dc_i}{dl} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad \frac{dT}{dl} = 0;$ $r = 0, \quad \frac{dc_i^*}{dr} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad \frac{dT}{dr} = 0;$ $r = R, \quad D_{\text{эф}}^i \frac{dc_i^*}{dr} = K_g(c_i - c_i^0), \quad i = 1, 2, \dots, n,$ $\lambda_{\text{эф}} \frac{dT}{dr} = \alpha' (T^* - T)$

Таблица 4.7 (окончание)

Модель реактора	Гомогенный реактор	Гетерогенный реактор
Ячеичная с обратными потоками	$V_m(c_i^{k-1} - c_i^k) + g_m(c_i^{k-1} - c_i^k) - V_{k,R}^R(c_i^k, T) = 0,$ $i = 1, 2, \dots, n$	<p>Покомпонентный материальный баланс:</p> $V(c_i^{k-1} - c_i^k) + g_m(c_i^{k-1} - c_i^k) - K_g V(c_i^k - c_i^{*k}) = 0$ $K_g V(c_i^k - c_i^{*k}) - V H_i(c_i^{*k}, T^{*k}) = 0,$ $i = 1, 2, \dots, n$
	<p>Тепловой баланс:</p> $V \rho c_p (T_{k-1} - T_k) + c_p g_m (T_{k+1} - T_k) + V \rho c_p (T_{k+1} - T_k) + \varepsilon \rho c_p (T_{k+1} - T_k) - \alpha \Delta V (T_k - T_k^*) = 0,$ $+ V_k Q_r (c_k, T_k) = 0,$ $V_j = V_{ax} + g_j, \quad j = m, \tau$	<p>Тепловой баланс:</p> $V \rho c_p (T_{k-1} - T_k) + \varepsilon \rho c_p (T_{k+1} - T_k) - \alpha \Delta V (T_k - T_k^*) = 0,$ $+ V Q_r (c_k, T_k) = 0,$ $V_j = V_{ax} + g_j, \quad j = m, \tau$

Примечания. v — линейная скорость подачи фаз; α — коэффициент теплообмена; $T_{ст}$ — температура стенки реактора; d — диаметр реактора; n — поверхность раздела фаз; T^* , c_i^* — температура и концентрация компонента на поверхности раздела фаз соответственно; K_g — коэффициент массообмена; ε — порозность слоя; $D_{i,эф}$ и $D_{T,эф}$ — эффективный коэффициент продольной и поперечной диффузии соответственно; $\lambda_{L,эф}$ и $\lambda_{T,эф}$ — эффективный коэффициент продольной и поперечной теплопроводности соответственно; D_L и $D_{эф}$ — эффективный коэффициент продольной диффузии для связанной фазы и в грануле катализатора соответственно; λ_L и $\lambda_{эф}$ — соответствующая D_L и $D_{эф}$ теплопроводность; R — радиус гранулы; α' — коэффициенты теплообмена теплообменника гранулы катализатора; V_{ax} , g — объем и обратный поток соответственно; индекс m и τ относятся к веществу и телу соответственно.

обеспечения (равномерности распределения в объеме и подвода элементов питательной среды, углеродосодержащего субстрата и кислорода). Поэтому развитие клеточной популяции связано с транспортированием питательных веществ из массы жидкости к поверхности клетки и отводом продуктов метаболизма от нее, т. е. с гидродинамической обстановкой в аппарате и кинетикой массопереноса.

Биохимические процессы в основе осуществляют превращение одной субстанции в другую с помощью живых клеток, однако более рационально и экономично, чем химическое превращение. И в основе их описания широко используется математический аппарат описания многофазных химических реакторов. Ферментационная среда представляет собой многофазную систему, содержащую пузырьки газа (аэрирующий газ — источник кислорода), питательную жидкость и квазитвердую фазу (клетки — продуценты биомассы). Гидродинамика такой системы чрезвычайно сложна, поэтому чаще всего анализ структуры потоков сводится к псевдогомогенной системе (водная фаза — клетки). Но даже и в общем случае модели структуры потоков и массопереноса, полученные для процессов химического превращения, с учетом характерных особенностей могут быть использованы при исследовании биохимических реакторов [1, 50, 51].

Итак, алгоритмизация этапа технологического расчета единиц оборудования состоит в разработке соответствующего математического описания, выборе метода решения системы уравнений этого описания, определении параметров, установлении адекватности модели реальному объекту, т. е. в разработке математической модели объекта. Независимо от функционального назначения элемента схемы математическая модель должна строиться по модульному принципу, причем таким образом, чтобы можно было иметь возможность при необходимости достаточно легко внести нужные изменения (дополнения или расширения функций) в модель без ее значительной переработки. Основная функция модели состоит в сведении материального и теплового балансов — получении выходных данных потока по входным. В зависимости от назначения математического описания отдельных явлений процесса (фазовое и химическое равновесие, кинетика массопередачи, гидродинамика потоков и т. д.) общее математическое описание может быть существенно различным. Важно при создании модели не нарушать общей ее структуры, т. е. иметь возможность использования единых алгоритмов решения.

4.2.3. Выбор технологической схемы производства

Ранее отмечалось, что возможны два подхода к синтезу технологической схемы производства: при отсутствии или наличии исходного варианта. Первый подход свойствен синтезу схем с однородны-

ми элементами (например, разделение многокомпонентных смесей методом ректификации). Однако и в этом случае получаемый вариант схемы производства часто является лишь исходным и нуждается в дальнейшей оптимизации (уточнение количества и характеристик рециркулируемых потоков по теплу и массе). Поэтому синтез схемы чаще сводится к оптимизации некоторого известного варианта (конкретного или гипотетического) путем внесения изменений по определенным правилам. В любом случае необходимо обладать методом расчета технологической схемы произвольной структуры. Эта задача весьма многомерная и трудоемкая, поэтому часто для ускорения ее решения принимаются упрощенные математические модели единиц оборудования на уровне балансовых соотношений с коэффициентами деления потоков. Имея основным недостатком неточность воспроизведения действительной обстановки в аппаратах технологической схемы, такой подход позволяет «просматривать» ХТС в целом и решать задачи общей увязки материальных и энергетических потоков.

Алгоритмически задача выбора технологической схемы состоит в разработке или выборе методов ее анализа, оценки, оптимизации и синтеза. На этапе анализа составляются уравнения математического описания, задаются переменные процесса и схемы, и в результате решения получается информация о потоках, температурах, давлении, составах, размерах и т. д. Оценка состоит в совместном использовании информации с предыдущего этапа и экономических данных для определения целевой функции. Оптимизация состоит в поиске наилучшего набора переменных процессов. Традиционно разработка технологических схем проводится на основании итерационного выполнения указанных этапов, и лишь в последнее время стало уделяться внимание этапу синтеза, который призван объединить в себе все предыдущие этапы на основе некоторого метода. Известно большое число методов синтеза [4, 52], основанных на различных подходах, и многим из них присуща необходимость использования некоторого метода решения систем нелинейных уравнений или метода оптимизации. Последние используются для сведения материального и теплового баланса схем. Задачи решения систем уравнений и минимизации некоторого функционала взаимосвязаны и могут быть сведены одна к другой. Например, условием минимума функции $F(x)$ является равенство нулю частных производных $\partial F / \partial x_i = 0$, $i = 1, 2, \dots, n$, а система уравнений $f_i(x) = 0$, $i = 1, 2, \dots, n$, может быть решена путем минимизации соответствующим образом подобранного функционала, в частности $\sum_{i=1}^n f_i(x)^2 = 0$. Поэтому трудности, возникающие в задачах оптимизации, характерны и для решения систем нелинейных уравнений.

Существуют различные классификации итерационных методов.

В частности, методы разделяются по количеству иерархических уровней (одноуровневые и многоуровневые), по порядку производных, используемых в процессе поиска решения и т. д. Наиболее широкое распространение в задачах анализа и синтеза ХТС находят методы нулевого (без вычисления производных) и первого порядков. Наряду с ними все более широкое применение получают и многоуровневые методы (в частности, двухуровневые), в основе которых лежит идея декомпозиции исходной задачи на ряд подзадач меньшей размерности. Использование линеаризации уравнений математического описания на первом уровне позволяет эффективно применять хорошо разработанный аппарат линейной алгебры. На первом уровне подсистемы рассчитываются независимо друг от друга, а второй уровень служит для координации оптимальных решений с целью достижения общего оптимума системы. Стратегия координации решений в целом может осуществляться с использованием алгоритмов явной или неявной декомпозиции. Одно из важных преимуществ метода многоуровневой оптимизации заключается в том, что с его помощью можно существенно сократить время решения общей задачи и требуемый объем оперативной памяти. Сокращение времени расчета может быть достигнуто за счет одновременной оптимизации подсистем с помощью параллельно работающих процессов ЭВМ. Однако следует отметить, что многоуровневые методы обеспечивают сходимость итерационного процесса только при определенных условиях, налагаемых как на целевую функцию и математическое описание, так и на декомпозицию исходной ХТС на подсистемы [4, 53]. К тому же доказательств условной сходимости многоуровневых методов практически нет.

Алгоритм оптимизации ХТС с помощью методов первого порядка сводится к выполнению следующих шагов [54]: задается начальное приближение по варьируемым переменным; рассчитывается схема (решаются уравнения основного процесса); определяются частные производные (или решаются уравнения сопряженного процесса); с помощью некоторого метода спуска вычисляется новое приближение, проверяются критерии сходимости, а в случае их невыполнения осуществляется возврат ко второму шагу.

Наиболее трудоемким является вычисление производных. Если они рассчитываются численно (а это для сложных схем часто единственный способ), то необходимо многократно пересчитывать схему. Помимо больших затрат времени численное определение производных имеет недостатком низкую точность и вследствие этого ошибки аппроксимации, особенно в окрестности экстремума. Применение же уравнений сопряженного процесса, по-видимому, эффективно в случае явной функциональной зависимости между выходными и входными переменными. В реальных условиях эта зависимость обычно неявная. Что касается метода спуска для вычисления нового приближения, то здесь имеются достаточно эффективные методы [55, 56].

Исходя из сложности задачи и общей стратегии декомпозиции проблема синтеза технологической схемы обычно подразделяется на ряд подпроблем, а именно: синтез стадий химического превращения и выделения продуктов реакций. Помимо этого возникает задача рационального объединения источников и стоков энергии внутри схемы для снижения внешнего энергопотребления. Каждая из стадий достаточно специфична в силу различной природы решаемых вопросов (например, нельзя говорить о технологической схеме, пока не определен набор исходных реагентов, не установлен механизм химических реакций и не определены условия их протекания, обеспечивающие получение требуемых продуктов). Поэтому после определения совокупности элементов технологической схемы (4.39), возможно, в рамках отдельных подсистем необходимо: 1) на основании расходных коэффициентов и режимных параметров эксплуатации отдельных аппаратов сформировать ограничения по материальному и тепловому балансу схемы и определить исходный вариант производства; 2) выработать предельно оптимальную технологическую схему, отвечающую всем поставленным задачам производства; 3) выполнить оптимизацию технологической схемы в целом и на уровне отдельных аппаратов.

Ограничения по материальным и энергетическим потокам выявляются в некоторой степени на этапе анализа свойств реагентов, продуктов реакции и разделения, тепло- и хладоагентов, исследования фазового и химического равновесия. Предварительный же расчет отдельных аппаратов на этапе выбора способа (или альтернативных способов) ведения процесса позволяет найти реальные (в рамках принятых допущений) нагрузки с учетом эффективности. При наличии этих данных схема может анализироваться без детального проектирования отдельных элементов для получения оптимальной технологической схемы.

Стратегия получения оптимального варианта схемы может быть различной в зависимости от метода синтеза, например на основе эвристических правил или эволюционной стратегии (см. гл. 8). Однако в любом случае возникает необходимость в анализе множества вариантов схем, рассматриваемых либо последовательно, либо в рамках одной обобщенной гипотетической схемы. Этот процесс является итерационным с использованием соответствующих методов оптимизации.

В качестве примера на рис. 4.12 приведена последовательность усовершенствования исходного варианта схемы получения монохлордекана на основе эволюционной стратегии синтеза [57]. В основе процесса получения монохлордекапа лежат реакции фотохлорирования декана



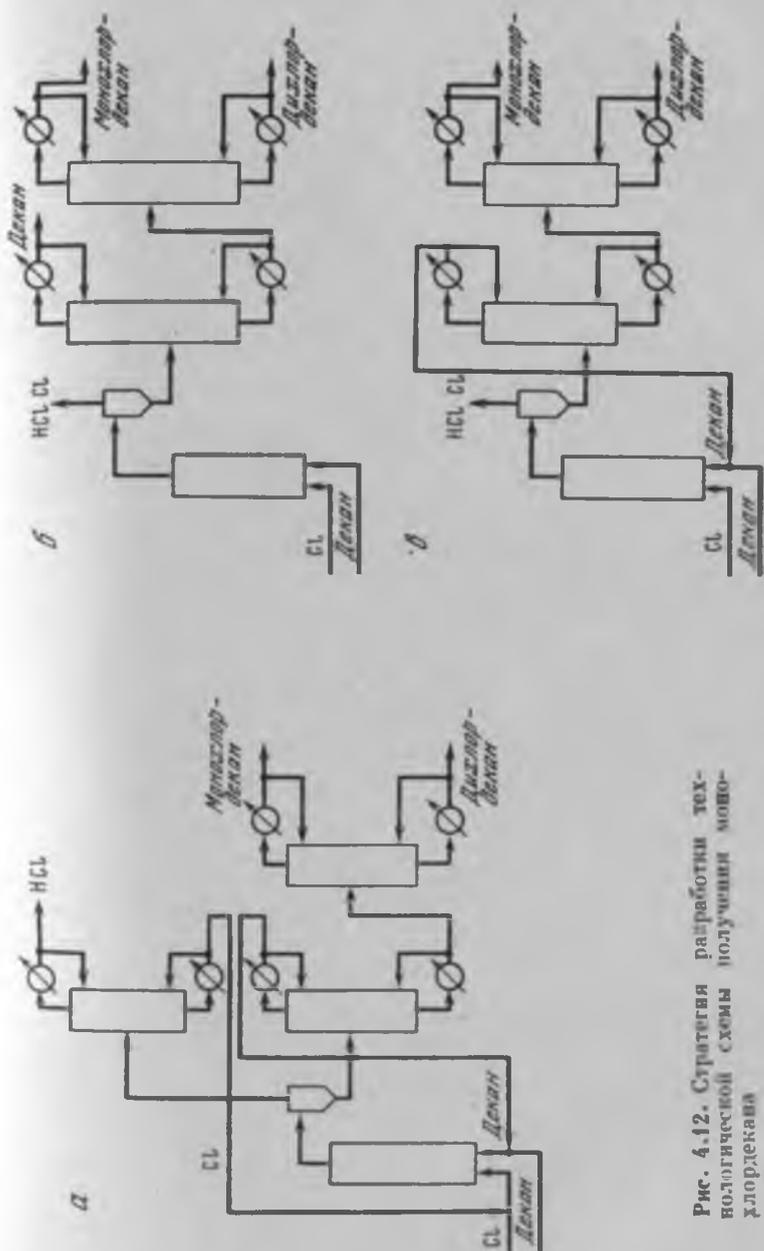


Рис. 4.12. Стратегия разработки технологической схемы получения монохлорэкана

При известных ценах на реагенты и продукты реакции, стоимости оборудования и эксплуатационных затратах в качестве начального варианта была рассчитана схема на рис. 4.12, а. Эта схема не содержит рециклов и предназначена только для получения монохлордекана. В дальнейшем была проанализирована возможность организации рецикла по декану (см. рис. 4.12, б). Критерием эффективности схемы являлась функция потоков следующего вида:

$$GL = \frac{GS + \left| \begin{array}{c} \text{Общая масса} \\ \text{перерабатываемого} \\ \text{материала} \end{array} \right|}{\left| \begin{array}{c} \text{Общая масса} \\ \text{полезных} \\ \text{продуктов} \end{array} \right| + \left| \begin{array}{c} \text{Общая масса} \\ \text{рециркулируемых} \\ \text{потоков} \end{array} \right|} + \frac{\left| \begin{array}{c} \text{Общая масса} \\ \text{нагрузки на} \\ \text{реакторы} \end{array} \right|}{\left| \begin{array}{c} \text{Общая масса} \\ \text{долевых} \\ \text{продуктов} \end{array} \right|}.$$

Здесь GS относится к процессу разделения и определяется в виде

$$GS = \left| \begin{array}{c} \text{Общее число} \\ \text{схем раздела-} \\ \text{ния} \end{array} \right| \left| \sum_j \right| \left| \begin{array}{c} \text{Число аппаратов} \\ \text{в схеме раздела-} \\ \text{ния} \end{array} \right| \left| \sum_{i \in j} \right| \left| \begin{array}{c} \text{Число выход-} \\ \text{ных потоков} \\ \text{в } i-1\text{-м аппа-} \\ \text{рате} \end{array} \right| \left| \begin{array}{c} \text{Массовая} \\ \text{нагрузка} \\ \text{на } i\text{-й} \\ \text{аппарат} \end{array} \right|$$

При введении рецикла величина критерия оказалась лучше, чем для первоначального варианта. Следующим шагом было введение рецикла по хлору, что обеспечило лучшее решение по сравнению с предыдущими вариантами (см. рис. 4.12, в). Дальнейший анализ показал, что степень конверсии по хлору не должна быть ниже 0,3. При степени конверсии от 0,3 до 0,6 предпочтительнее схема на рис. 4.12, в, а более 0,6 — схема на рис. 4.12, б.

Представляет интерес использование матриц Кирхгофа для анализа и расчета материальных и энергетических балансов технологических схем [58]. Для системы, представленной на рис. 4.13

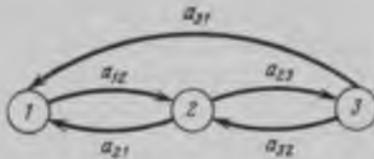


Рис. 4.13. Взаимосвязь элементов системы потоков субстанции

закон сохранения некоторой субстанции (массы, тепла, эксергии, энтропии и т. д.) можно записать в виде

$$\left| \begin{array}{c} \text{Поток субстанции,} \\ \text{покидающий элемент} \end{array} \right| + \left| \begin{array}{c} \text{Источник или} \\ \text{сток субстанции} \end{array} \right| = 0, \quad (4.78)$$

или в матричном виде

$$(T - T^*) \Gamma + \Delta j = 0, \quad (4.78a)$$

где

$$T = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & 0 \\ a_{21} & 0 & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & 0 \end{pmatrix}; \quad T^* = \begin{pmatrix} 0 & a_{21} & a_{31} \\ a_{12} & 0 & a_{32} \\ 0 & a_{23} & 0 \end{pmatrix}; \quad \Gamma = \begin{pmatrix} I \\ I \\ I \end{pmatrix}.$$

Тогда, раскрывая матричное выражение, можно записать систему линейных уравнений

$$a_{12} - a_{21} - a_{31} = \Delta J_1;$$

$$a_{21} - a_{12} + a_{23} - a_{32} = \Delta J_2;$$

$$a_{31} - a_{32} - a_{23} = \Delta J_3.$$

Задавая, например, мощность источников (стоков) и величины прямых потоков, можно определить величины рециклического и обратных потоков. Более того, при всех фиксированных потоках и источниках легко вычислить количество субстанции, которым система должна обмениваться с внешней средой.

Этот же подход может быть использован и для анализа системы в соответствии со вторым законом термодинамики

$$Q - W = D I + \Delta j, \quad (4.79)$$

где Q — вектор внешних тепловых потоков системы (входных или выходных); W — вектор, элементами которого является затраченная системой работа; D — матрица, элементами которой являются внутренние потоки энергии между объектами системы; Δj — вектор, элементами которого являются источники (стоки) энергии. Для циклических систем, очевидно, разность векторов $(Q - W)$ должна быть равна нулю.

4.3. Функциональная структура системы автоматизированного проектирования

Развитие и внедрение системного анализа как современного подхода к решению задач химической технологии, большое число математических моделей и совершенствование средств вычислительной техники обусловили становление качественно нового направления в использовании вычислительных средств и метода математического моделирования. Это направление заключается в создании прикладных операционных систем (систем моделирования и оптимизации, систем управления, САПР и т. д.) «как совокупности взаимодействующих элементов, объединенных единством цели или общими целенаправленными правилами взаимоотношений» [35].

Система, в частности САПР, как реализация системного подхода к исследованию технологических процессов является программно-машинным комплексом, состоящим из технических средств, системного и прикладного математического обеспечения и средств диалогового взаимодействия.

Целью создания систем является прежде всего концентрация прикладного математического обеспечения в форме, обеспечивающей доступ широкого круга пользователей и расширение возможностей по мере углубления знаний по отдельным процессам. А это

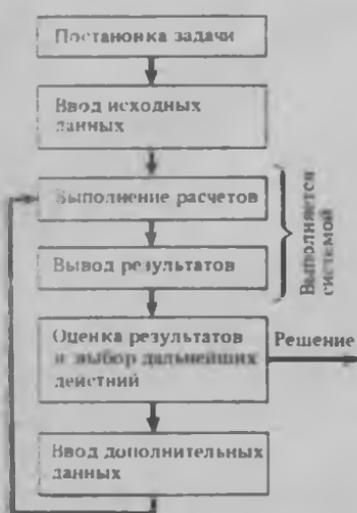


Рис. 4.14. Этапы работы человеко-машинной системы



Рис. 4.15. Обобщенная структура моделирующей системы

значит, что система должна обладать совершенными алгоритмами и доступными широкому пользователю средствами взаимодействия. Она должна на любом этапе разработки находить пользователя, ибо опыт эксплуатации поможет конкретнее определить направления совершенствования и дальнейшей разработки.

Для каждой области применения системы характерны свои математические модели, способы организации вычислений, специальные информационные базы. Однако всем системам присущи общие черты и, в частности, чрезвычайное разнообразие информации, а также сложность и многоступенчатость алгоритмов переработки этой информации. При этом решение большинства задач в рамках такой системы невозможно без непосредственного участия пользователя, роль которого можно свести к следующим действиям: постановке задачи; активной переработке информации, представленной системой в интерактивном режиме; выбору дальнейших действий в вычислительном процессе. Общая схема функционирования подобных человеко-машинных систем приведена на рис. 4.14.

В настоящее время как у нас в стране, так и зарубежом разработаны комплексы программ для решения задач химической технологии [53, 59—61]. К сожалению, публикации по подобным системам носят общий характер, скорее информационный или рекламный, и не дают полного представления о структуре, эффективности и т. п. Системы являются итогом многолетних работ целых коллективов, и поэтому имеются трудности подробного изложения информации о них в коротких сообщениях. К тому же большей частью при разработке таких систем решается задача применения

известных методов с точки зрения «стыковки» отдельных программ средствами развитых языков программирования. Теоретические же вопросы организации систем публикуются обычно независимо и часто не находят практического приложения.

Общепринятым подходом к разработке систем, в рамки которого укладываются разработки практически всех известных систем, является выделение отдельных подсистем с жестким функциональным подчинением. Обобщенная структура такой системы приведена на рис. 4.15. Анализ систем показывает, что основными фазами являются ввод, предпроцессорная обработка, вычислительная фаза, вывод.

Фаза ввода. Она обеспечивает связь пользователя с системой и состоит из стадий ввода, контроля и хранения данных. На этой фазе обычно поступает следующая информация: топология ХТС, данные о свойствах потоков, параметры блоков ХТС, последовательность вычислений в виде наименований модулей, стоимостные параметры. Большинство систем работает с информационной блок-схемой ХТС, которая должна быть подготовлена пользователем. По блок-схеме либо строится матрица инцидентий, либо составляется программа на языке программирования или проблемно-ориентированном языке для передачи топологии ХТС вычислительной машине. Следовательно, на стадии ввода пользователь сталкивается с необходимостью изучения либо формальных правил описания топологии, либо одного из языков описания схем на уровне языков программирования.

Функции предпроцессорной и вычислительной фаз существенно зависят от внутренней организации управляющей программы. В связи с этим различают системы с фиксированной и переменной структурой.

Системы с фиксированной структурой имеют управляющую программу, инвариантную по отношению ко всем задачам. Передача информации и вычислительная последовательность определяются данными, которые вводятся пользователем. Системы с такой структурой имеют то преимущество, что решение относительно небольших задач производится сравнительно быстро. Недостатком же их является необходимость загрузки всех модулей в память независимо от сложности задачи.

В системах с переменной структурой происходит генерация управляющей программы в зависимости от типа решаемой задачи. Обычно в таких системах используется проблемно-ориентированный язык, который либо интерпретируется непосредственно в исполнительный код, либо процедурно-ориентированный язык, который далее транслируется, редактируется и выполняется. В таких системах в оперативную память загружаются только те части управляющей программы, которые нужны для решения данной задачи. Такие системы обладают очевидными преимуществами, однако их разработка требует больших затрат.

Предпроцессорная фаза. В основном выполняет следующие функции: предкомпиляцию входного текста, последующую компиляцию исполнительской программы и редактирование, обращение к базам данных и структурный анализ системы с целью построения вычислительной схемы.

Вычислительная фаза. Непосредственно связана с получением результата и выполняется программными модулями системы. Обмен информацией между модулями производится через стандартный список параметров заголовка подпрограммы или с помощью специальных операторов. Наиболее трудоемким при расчете ХТС является вычисление рециклов и выполнение заданных ограничений. Эффективность вычислительной фазы в значительной степени зависит от правильности реализации в ней процедуры декомпозиции схемы, процедуры построения вычислительной последовательности определения разрывов, а также от критериев сходимости. При наличии развитых средств диалога чаще всего эти вопросы решаются в интерактивном режиме (особенно в системах общего назначения).

Общей чертой информационного обеспечения всех систем является то, что они, как правило, содержат библиотеки подпрограмм расчета свойств веществ и различные наборы данных для расчета параметров оборудования, стоимости и т. д. В качестве средства интерактивного взаимодействия в основном используются проблемно-ориентированные языки или языки директив.

Язык директив представляет собой фиксированный набор лексем естественного языка, жестко связанных с последовательностью вызываемых модулей. Языки директив предполагают знание пользователем некоторого набора команд управления системой. Они обладают такими преимуществами, как информативностью, выражаемой в совпадении мнемоники с названиями выполняемых действий; лаконичностью, достигаемой за счет мнемоники директивных предписаний; коммутативностью, подразумевающей подробную диагностику и выдачу подсказок. Среди недостатков этих языков следует отметить отсутствие достаточной гибкости при описании многофункциональной системы с большим числом различных программных модулей, а также сложность изучения при большом числе директив. Однако простота реализации позволила завоевать им широкую популярность.

Слова (директивы), имеющие определенную смысловую нагрузку, хранятся в системных словарях и являются ключевыми, а все остальные слова предложения при обращении к системе выполняют роль комментариев и могут использоваться по усмотрению пользователя. Обычно применяются многоуровневые директивные языки, когда одной директиве высшего уровня приписываются в качестве параметров несколько различных по функциям директив нижнего уровня. Например, директиве «Расчитать» можно поставить в качестве параметров директивы «Реактор», «Абсорбер».



Рис. 4.16. Формирование исполнительной директивы

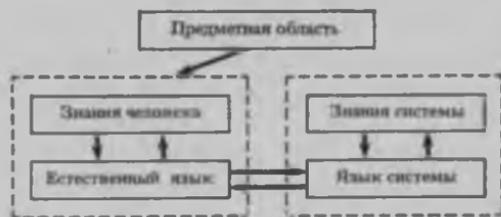


Рис. 4.17. Схема обобщенной диалоговой системы

«Теплообменник» и т. д. Ключевые слова могут иметь синонимы, которые позволяют строить предложения в некотором смысле произвольно. Выявление ключевых слов и собственно расшифровка задания производится синтаксическим анализом входного предложения, в результате чего формируется исполнительная директива, связанная с определенным модулем системы. Пример формирования такой директивы приведен на рис. 4.16.

Интерактивный режим взаимодействия в совокупности с языком директив положили начало диалоговым системам. Для современных систем наличие средств ведения диалога уже воспринимается как само собой разумеющееся. Вопрос лишь в том, на какой основе построен язык диалога. Тип диалоговой системы прежде всего зависит от типа входного языка. Необходимо знания человека о предметной области, выражаемые на естественном языке, адекватно преобразовать в знания системы (математические модели), выражаемые на языке системы. Следовательно, проблема состоит в установлении однозначного соответствия между естественным языком и языком системы (рис. 4.17). По мере усложнения

математического описания объектов окружающего мира разработке диалоговых средств или средств взаимодействия уделяется все большее внимание не только при решении проблемы «искусственного интеллекта», но и в прикладных системах переработки информации.

4.3.1. Построение модели предметной области

Современная тенденция разработки теории и практики систем состоит в придании им способности принятия решений. Это находит выражение в разработке некоторых моделей принятия решений человеческим интеллектом. В непосредственной связи с этой проблемой (проблемой «искусственного интеллекта») в середине 60-х годов начало развиваться направление, получившее название «Представление знаний» и связанное с разработкой моделей предметной области, адекватно отображающих понимание человеком реального мира [62]. Правильно выбранный способ представления знаний обеспечивает не только эффективность системы, но и часто саму возможность создания такой системы.

Все модели представления знаний можно разделить на три класса: декларативное, процедурное и семантическое [63]. В декларативных представлениях описание состояний — это множество утверждений, в значительной степени независимых от того, где их использовать [64]. При процедурном представлении знаний информация дается в виде процедур, программ, задающих алгоритм преобразования между единицами знаний для данной предметной области. Семантическое представление предметной области является аналогом способа представления знаний у человека. Его определяющими характеристиками являются описание объектов мира на уровне естественного языка, накопление знаний, включая вновь поступившие факты, в относительно однородной памяти, определение ряда унифицированных семантических отношений между объектами, которым соответствуют унифицированные методы вывода.

Существует несколько способов семантического представления. К ним относятся модели, основанные на математической логике и реализуемые аппаратом исчислений предикатов первого порядка [65]; реляционные модели, в основе которых лежит задание информации в виде таблиц [66]; ситуационные модели, в которых выделяются множества объектов и набор многоместных отношений между ними [67]; семантические сети [4]. Сеть можно представить в виде графа, вершинам которого соответствуют абстрактные ситуации, конкретные события, объекты, а дуги указывают связи и тип отношения между этими «сущностями». Другой способ задания семантической сети основан на теоретической разработке структуры нейронных сетей центральной нервной системы человека [68].

Для построения семантической модели было предложено использовать теорию фреймов [69]. Исходным моментом теории служит тот факт, что человек, идентифицируя определенную ситуацию реальной действительности, выбирает из своей памяти некоторую структуру данных (образ), наиболее отвечающую признакам данной ситуации, называемую фреймом (от английского frame — каркас). При этом он приспособливает фрейм изменением его отдельных частей для понимания более широкого класса явлений, в частности данной ситуации. По определению фрейм является структурой данных для представления стереотипной информации.

С каждым фреймом связана информация разных видов. Одна ее часть указывает, каким образом следует использовать данный фрейм, другая — что предположительно может повлечь за собой его выполнение, третья — что следует предпринять, если окажется, что ожидания не подтвердились.

Структуру фрейма можно представить в виде сети, состоящей из узлов и связей между ними. Верхние уровни вершин фрейма определены, так как образованы понятиями, которые всегда справедливы по отношению к предполагаемой ситуации. На более низких уровнях имеется много особых вершин, называемых терминалами, которые заполняются в процессе активизации фрейма характерными примерами или данными. Каждая терминальная вершина может быть связана с определенным условием задания этой вершины. Простые условия задаются маркерами, например, в виде требования на определенный тип данных или на объект подходящего размера, маркер может также указывать на другой фрейм, который определяет терминал. Более сложные условия определяют тип отношений между понятиями, которыми будут даваться терминальные вершины фрейма.

В памяти ЭВМ фрейм можно представить с помощью скобочной записи или в виде дерева графов. Например, фрейм «Ректификационная колонна» можно записать следующим образом [70]:

Ректификационная колонна

((тип = тарельчатая)

(имя = Ω_1)

(потоки (питание ((номер = Ω_2) (состав = Ω_3)))

(дистиллят ((номер = Ω_4) (состав = Ω_5)))

(кубовый продукт ((номер = Ω_6) (состав = Ω_7))))

(тарелки (количество = Ω_8)

(тарелка питания = Ω_9)

(тарелка бокового отбора = Ω_{10})

(флегмовое число = Ω_{11})

В такой записи знак равенства ставится между именем терминала и областью его задания или экземпляром. В данном примере

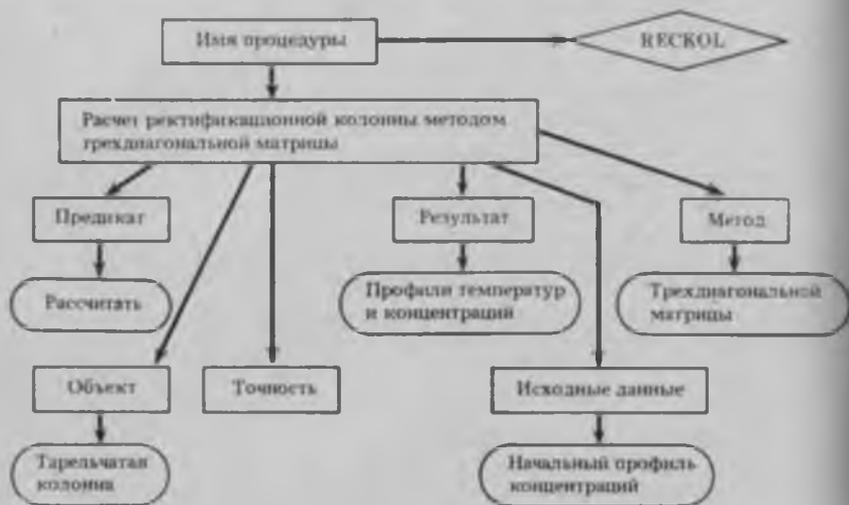


Рис. 4.18. Структурная схема фрейма «Расчет ректификационной колонны» методом трехдиагональной матрицы»

терминал «тип» (ректификационной колонны) заполнен экземпляром «тарельчатая», остальные терминалы задаются областью определения. Для получения экземпляра фрейма необходимо задать экземпляры (значения) всех терминалов.

Пример фрейма программного модуля «Расчет ректификационной колонны методом трехдиагональной матрицы» в виде дерева приведен на рис. 4.18. В этом случае имени фрейма соответствует корень дерева, именам субфреймов (подструктур фрейма или фреймов второго уровня) — узлы дерева, а именам терминалов — листья дерева.

Важное свойство фрейма с точки зрения построения диалоговых систем заключается в возможности определения его как множества вопросов, необходимых для задания определенной ситуации. На основе этих вопросов происходит уточнение тем, связанных с идентификацией ситуации, и определяются методы, требуемые для этих целей. Теория фреймов в целом еще не сформировалась. Например, отсутствует формальное определение фрейма, не установлены правила его трансформации. Тем не менее идеи, положенные в ее основу, являются перспективными и широко развиваются [62, 71, 72].

Итак, основная цель разработки моделей представления знаний или описания предметной области состоит в выработке соглашений о том, как описывать реальный мир, т. е. строить такие математические модели объектов реального мира, для которых соответствие с проблемными знаниями может быть установлено на

основе совпадения имен переменных модели и имен понятий без каких-либо дополнительных пояснений и установления дополнительных неформальных соответствий [62, 73]. Традиционный способ представления знаний заключается в том, что на естественном языке вводятся основные понятия и отношения между ними и устанавливается соответствие между характеристиками этих понятий и параметрами соответствующей математической модели. Модели представления знаний имеют целью выработки аппарата формализации процесса построения математической модели по неформальному знанию. Это весьма трудоемкий процесс, поскольку он выполняется вручную и состоит в переходе от содержательных неформальных понятий к их формальным моделям, к тому же научные и профессиональные знания даже в рамках ограниченной проблемной области чрезвычайно обширны. В качестве основных задач описания предметной области можно отметить разработку методологии построения проблемно-ориентированных математических моделей, формализмов представления проблемно-ориентированных математических моделей, теории и методов вычислений в проблемно-ориентированных математических моделях и разработку программной поддержки представления знаний [62].

4.3.2. Обеспечение взаимодействия пользователя с системой

Языки диалогового взаимодействия можно разделить на три класса: языки, построенные на основе языков программирования; языки ключевых слов; языки, близкие к естественным.

Диалоговые языки первого класса строятся либо расширением языков программирования высокого уровня (ПЛ-1, фортран), либо адаптацией к конкретной предметной области и имеющимся вычислительным средствам. Синтаксически такие языки не отличаются от соответствующих языков программирования и легко доступны для изучения специалистам в области программирования. Их достоинством является гибкость, универсальность. Основной же недостаток — необходимость изучения языков программирования.

Языки второго класса получили наибольшее распространение в силу их кажущейся близости к естественным и простоты реализации. Среди методов построения этих языков можно выделить следующие направления: использование фиксированного контекста, предоставляемого пользователю системой; использование языка директив с жесткой фиксацией формы предложения; использование языка ключевых слов с применением различных формальных грамматик.

Язык фиксированных контекстов наиболее прост для изучения, но сильно ограничен, так как привязан к конкретной предметной области вычислительными возможностями системы.

Языки ключевых слов с использованием формальных грамматик [74] среди языков второго класса наиболее приспособлены к ведению сложных вычислительных процессов. Они достаточно близки по синтаксису к естественным языкам и в значительной степени могут обладать свойствами языков программирования, за исключением (в силу линейности) возможности построения рекурсивных форм. Грамматика этих языков выражается с помощью нормальной Бэкусовой формы. К недостаткам их относятся жесткая привязка к предметной области, а также необходимость основательного изучения пользователем.

Кардинальное решение проблемы взаимодействия лежит на пути создания систем, понимающих естественный язык. Под термином «естественный язык» понимается язык научной и технической информации. Однако использование естественного языка в качестве языка взаимодействия ставит перед разработчиками целый ряд проблем, что объясняется отсутствием теории естественных языков [75]. Среди главных трудностей, связанных с построением теории естественного языка, можно выделить следующие: словам не соответствует фиксированный смысл, например, широко известны такие понятия, как синонимы, омонимы, к тому же конкретное значение слова зависит от его интерпретации индивидуумом; непрерывное развитие языка (стабилизация словарного состава и грамматических форм естественного языка приводит к постепенному его отмиранию); смысл предложения и отдельных его частей связан с предыдущим контекстом, отсюда и многочисленные сокращения грамматических форм (эллипсы) в тексте [76, 77].

Однако, используя такие особенности автоматизированных систем, как конкретная область применения, ограниченные функциональные возможности, заданные цели функционирования, а также вводя некоторые ограничения на словарный состав, грамматику и максимально используя человеческие факторы взаимодействия [78, 79], удается реализовать естественный язык в качестве языка человекомашинных систем. В этой связи важно уточнить, что подразумевается под процессом «понимания» машиной текста на естественном языке. Наибольшую известность в системах «искусственного интеллекта» приобрел принцип Вайсенбаума [80], согласно которому считается, что предложение понято, если обращающийся, преследуя некоторую цель, обратился к человеку или машине и добился своей цели. При этом, как показали исследования [76, 81], процесс выявления смысла предложения на естественном языке невозможен без привлечения специально организованных «знаний» системы о предметной области, например, в форме семантических моделей.

Одной из развитых математических моделей естественного языка являются расширенные транзитивные сети Вудса [82, 83], основанные на использовании синтаксиса во всей его полноте и сложности. По своей сути расширенная транзитивная сеть является

конечным автоматом разбора предложения естественного языка в зависимости от синтаксических признаков слов [84]. Сети Вудса в отличие от конечных автоматов обладают рекурсивной, обеспечивающей возможность вызова из одной сети другую подсеть, а также выполняют проверку регистров условия перехода и изменение их содержания.

Работы Хомского [85] послужили началом развитию трансформационных грамматик. Согласно этой теории для адекватного перевода необходимо к синтаксической структуре исходного предложения применить формальные правила трансформаций для получения синтаксической структуры другого языка. Важным результатом такого подхода было создание теории формальных языков [86].

Анализируя различные математические модели языка, можно сделать вывод о том, что теория достаточно отработана, приспособлена для машинной реализации, однако главный акцент делается на синтаксическую структуру предложения и не дается рекомендаций по построению смысла текста.

Другой подход основан на разработке психологических моделей естественного языка, основанных на предположении о второстепенности роли синтаксического анализа и ограниченности контекста в рамках реального диалога. Так, в работе [87] предложена концепция системной грамматики, в которой выделяются три базовых ранга единиц: Предложение, Группа слова, Слово. Имеется несколько типов групп: Группа существительного, Группа прилагательного, Глагольная группа, Предложная группа. Каждое слово считается интегральной единицей: оно не расщепляется на гипотетические атомы, а предполагается, что все формы слова — это одно слово, но с разным набором признаков. Полная модель языка имеет форму программы его разбора, а грамматика рассматривается как набор инструкций для разбора предложения языка.

Представляют интерес работы, выполненные группой Шенка [88]. Ею разработана теория концептуальных зависимостей, в соответствии с которой целью анализа предложения является не разбор до синтаксических структур, а обнаружение значения предложения в том контексте, в котором оно появилось. Синтаксис как инструмент играет при этом незначительную роль. Основную часть информации для процесса разбора представляют альтернативные значения слов предложения. При этом не делается явного различия между лингвистической и нелингвистической информацией о частях предложения. Базовым механизмом «понимания» предложения является анализ ситуации, наиболее вероятной в ближайшем будущем. С каждой ситуацией связывается определенный набор действий, требующих выполнения в данной ситуации.

Психологические модели, по-видимому, являются перспективным инструментом для разработки подсистем взаимодействия на

естественном языке. Однако с практической точки зрения их реализация весьма трудоемка, поскольку требуется высокая лингвистическая подготовка (используется значительное число специальных понятий и досконально прорабатываются слова языка), структура анализаторов сложна, а объем программ прямо пропорционален числу используемых слов.

Итак, несмотря на всю привлекательность, использование естественного языка в качестве языка диалога сопряжено с огромными трудностями, и эта проблема на данном этапе развития теории «искусственного интеллекта» практически неразрешима. Однако реализация диалога на естественном языке, ограниченном профессиональной лексикой, — вполне реальная задача. В таком языке ограничения накладываются в основном на лексический состав словаря и синтаксический тип предложения. Взаимоотношение между искусственными и естественными языками в плане развития вычислительной техники и средств программирования представлено на рис. 4.19 [64].

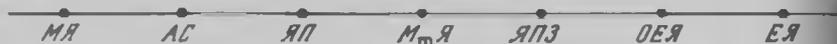


Рис. 4.19. Взаимоотношение искусственных и естественного языков

Слева располагается машинный язык (МЯ), а справа — естественный язык (ЕЯ). Промежуток между ними заполнен языками разной степени сложности и формализмов: языком ассемблер (АС), языками программирования (ЯП), метаязыками (М_тЯ), языками представления знаний (ЯПЗ) и ограниченными естественными языками (ОЕЯ). В зависимости от квалификации в области программирования и вычислительной техники пользователь в той или иной мере удален от машинных языков. При разработке же систем нужно исходить из того, что он (пользователь) находится справа. Это лишь обеспечит системе широкое применение в практике повседневных расчетов пользователей — неспециалистов в области вычислительной техники.

Диалоговое взаимодействие предполагает наличие двух этапов диалога — передачу информации от пользователя к системе и передачу информации от системы к пользователю. В соответствии с этими этапами язык взаимодействия можно разделить на две части — язык ввода информации в систему (Е-язык) и язык вывода информации из системы (Е_в-язык) (рис. 4.20).

Основная задача относительно Е-языка состоит в анализе Е-предложения, а относительно Е_в-языка — в синтезе Е-предложения. Известно [89], что анализ естественного языка алгоритмическими методами проводить проще, чем синтез. Поэтому, хотя теоретически Е-язык и Е_в-язык могут совпадать, целесообразно

в качестве Е-языка использовать профессиональный язык пользователя (например, химика-технолога), а в качестве E_1 -языка — формальный язык шаблонов-таблиц фреймов.

Рассмотрим один из способов определения Е- и E_1 -языков [90]. Будем считать, что ввод информации на Е-языке осуществляется порциями не более чем из одного синтаксически простого (одно сказуемое) предложения. После каждой порции пользователь получает ответ на E_1 -языке. Кроме того, для любого предложения принципиально возможно нахождение адекватного фрейма (процедуры), причем не более одного. Лексический состав словаря полностью определяется набором фреймов (или подпрограмм), незнакомое слово система может интерпретировать как неинформативное и ставит в известность пользователя об его отсутствии в словаре.

Указанные условия относительно Е-языка являются исчерпывающими для его определения и изучения пользователем. Транслятор Е-языка строится таким образом, что пользователю для взаимодействия с системой необходимы знания только общих функций системы. Пользователь должен четко формулировать задание.

Словарной единицей Е-языка является Е-лексема, определяемая следующим образом. Это либо лексема естественного языка, ограниченного профессиональной лексикой, либо установившееся сочетание нескольких таких лексем (идиома), либо установившееся сокращение (аббревиатура). К Е-лексемам относятся также знаки препинания. Примерами Е-лексем являются: «поток», «ХТС», «кг/см», «вычислить», «метод Гаусса».

В множестве Е-лексем в соответствии с грамматическими принципами частей речи следует выделить подмножества, достаточные для целей построения диалоговых систем. Это подмножества С-, Д-, Н-, М- и П-лексем. Каждое из этих подмножеств определяется на интуитивном уровне исходя из общепринятых представлений о членении предложения.

Подмножество С-лексем состоит из Е-лексем, играющих, как правило, роль сказуемого в предложении, а именно Е-лексем, выражающих некоторое действие, указание или вопрос. Например: «рассчитать», «выдать», «сколько», «почему». Эти лексемы выполняют главную роль в предложении, как это следует из структуры фрейма (см. рис. 4.18).

Подмножество Д-лексем состоит из Е-лексем, соответствующих объектам предметной области и их характеристикам. Д-лек-



Рис. 4.20. Структура языкового взаимодействия в САИР

семы в предложении играют роль подлежащих, дополнений, определений. Например: «колонна», «в смеси», «направленные».

Подмножество М-лексем состоит из Е-лексем, являющихся характеристиками С-лексем. К таким характеристикам относятся используемые методы, особенности действия, признаки действия. В предложении М-лексемы могут играть роль как обстоятельств, так и дополнений. Например: «метод Ньютона—Рафсона», «приближенно», «на печать».

Подмножество Н-лексем является множеством неинформативных лексем. К этому подмножеству можно отнести Е-лексемы, отсутствующие в словаре системы.

Подмножество П-лексем состоит из Е-лексем, имеющих вспомогательное значение. Например: знаки препинания, сочинительные союзы, подчинительные союзы.

Следует заметить, что задача определения класса некоторой Е-лексеи является недостаточно формализованной и зависит от способа описания фреймов и алгоритмов анализа Е-предложений.

Формальное определение Е-предложения, выражающее суть Е-языка, можно описать следующим образом:

$\langle \text{Е-предложение} \rangle ::= \langle \text{последовательность лексем} \rangle \langle \text{сказуемое} \rangle$
 $\langle \text{последовательность лексем} \rangle$
 $\langle \text{сказуемое} \rangle ::= \langle \text{С-лексема} \rangle$
 $\langle \text{последовательность лексем} \rangle ::= \langle \text{лексема} \rangle \langle \text{лексема} \rangle \dots \langle \text{последовательность лексем} \rangle$
 $\langle \text{лексема} \rangle ::= \langle \text{объект} \rangle | \langle \text{метод} \rangle$
 $\langle \text{объект} \rangle ::= \langle \text{последовательность Д-лексем} \rangle$
 $\langle \text{последовательность Д-лексем} \rangle ::= [\langle \text{П-лексема} \rangle] \dots \langle \text{Д-лексема} \rangle \dots$
 $\dots [\langle \text{уточняющее нмя} \rangle] | [\langle \text{П-лексема} \rangle] \dots \langle \text{Д-лексема} \rangle \dots [\langle \text{числовая константа} \rangle] \langle \text{последовательность Д-лексем} \rangle$
 $\langle \text{метод} \rangle ::= \langle \text{М-лексема} \rangle$

Основой определения Е,-языка является понятие шаблонов-таблиц фреймов системы. Шаблоны-таблицы фреймов состоят из стандартных наборов последовательностей Е-лексем и свободных позиций в некотором формате для выводимых данных. Предложение Е,-языка формируется в результате обработки структуры фреймов (выполнения некоторых действий).

При определении Е,-языка все множество фреймов системы подразделяется на две группы, соответственно выделяются шаблоны-таблицы функциональной среды системы (ФС-таблицы). Последние относятся к алгоритмической части системы. Формально Е,-язык можно определить следующим образом:

$\langle \text{Е-предложение} \rangle ::= \langle \text{последовательность} \quad \text{ФС-таблиц} \rangle | \langle \text{последовательность БД-таблиц} \rangle$
 $\langle \text{последовательность} \quad \text{ФС-таблиц} \rangle ::= \langle \text{ФС-таблица} \rangle | \langle \text{ФС-таблица} \rangle \dots \langle \text{последовательность} \quad \text{ФС-таблиц} \rangle$

$\langle \text{последовательность БД-таблиц} \rangle ::= \langle \text{БД-таблица} \rangle | \langle \text{БД-таблица} \rangle$
 $\langle \text{последовательность БД-таблиц} \rangle$
 $\langle \text{ФС-таблица} \rangle ::= \langle \text{последовательность ФС-строк} \rangle$
 $\langle \text{последовательность ФС-строк} \rangle ::= \langle \text{ФС-строка} \rangle | \langle \text{ФС-строка} \rangle \diamond$
 $\diamond \langle \text{последовательность ФС-строк} \rangle$
 $\langle \text{ФС-строка} \rangle ::= \langle \text{Е-лексема} \rangle | \langle \text{последовательность Е-лексем} \rangle _$
 $_ \langle \text{ФС-формат} \rangle \langle \text{тип Е-лексемы} \rangle$
 $\langle \text{БД-таблица} \rangle ::= \langle \text{последовательность БД-строк} \rangle$
 $\langle \text{последовательность БД-строк} \rangle ::= \langle \text{БД-строка} \rangle | \langle \text{БД-строка} \rangle \diamond$
 $\diamond \langle \text{последовательность БД-строк} \rangle$
 $\langle \text{БД-строка} \rangle ::= \langle \text{последовательность БД-лексем} \rangle _ \langle \text{БД-формат} \rangle$
 $\langle \text{единицы измерений} \rangle$
 $\langle \text{БД-формат} \rangle ::= \langle \text{позиции} \rangle \langle \text{позиции} \rangle$

Здесь символ \diamond означает пропуск строки, а $_$ — пропуск позиции на экране дисплея; знаки в записи формул: $|$ — «или», $::=$ — «по определению есть».

4.3.3. Формальное определение диалоговой системы автоматизированного проектирования

Сложность математического описания как на уровне отдельных аппаратов, так и схемы в целом диктует необходимость разработки диалоговых систем анализа и синтеза химических производств, способных служить своеобразным мостиком между прикладным математическим обеспечением и потребностями практики проектных и исследовательских расчетов. Основная практическая цель разработки диалоговых систем — это обеспечение широкого доступа к современным методам расчета неспециалистам в области вычислительной техники. Ниже излагается подход к разработке интерактивной диалоговой системы для решения задач химической технологии, обеспечивающей эффективную организацию вычислительного процесса и ведение диалога на языке, близком по синтаксису к профессиональному языку химика-технолога [70, 91].

Диалоговой системой синтеза и анализа ХТС будем называть систему

$$C = (F, P, G, S, I, T). \quad (4.80)$$

Каждый из элементов системы определяется следующим образом. Банк данных F состоит из совокупности наборов данных $\{F_i\}$, каждый из которых имеет только ему присущие структуру и состав. Такой набор называется файлом и содержит пронумерованную последовательность элементов $d_i^F \in F$, называемых записями файла. Записи файла являются элементами Декартова произведения некоторых непересекающихся подмножеств однородных данных множества количественных и качественных характери-

стик химико-технологического процесса:

$$d_i^F \in D^F = D_1 \otimes \dots \otimes D_k. \quad (4.81)$$

Например, файлы физико-химических и термодинамических свойств веществ, технологических и конструктивных параметров оборудования.

Программный модуль $p \in P$ — это отображение вида

$$p_i D_i^F \rightarrow D_2^F \quad (4.82)$$

множества входных файлов модуля в множество выходных файлов модуля. Например, программный модуль расчета констант химических реакций, модуль расчета абсорбера и т. д.

Оператор условия $g \in G$ имеет вид

$$\text{«Если } r(D^F), \text{ то } P_1, \text{ иначе } P_2\text{»}, \quad (4.83)$$

где $r: D^F \rightarrow \{0,1\}$ — диалоговый предикат, такой, что его вычисление осуществляется пользователем системы. Суть диалогового предиката сводится к определению истинности информации, представленной программным модулем. Например, «Если «точность результата достаточна», то (вывод результата) ..., иначе (итерация)...»

Для объединения различных по сути, но направленных на совместное решение задач анализа или синтеза ХТС таких элементов диалоговой системы, как алгоритмы, алгоритмические предписания и эвристические правила, вводится понятие метаалгоритма. Метаалгоритм $S \in \bar{S}$ состоит из конечной последовательности программных модулей $P \subset \bar{P}$ и таких операторов условия $G \in \bar{G}$, что если p_i используется в G , то $p_i \in P$. Примерами метаалгоритмов могут служить установленные совокупности алгоритмов расчета типовых комплексов, алгоритмы определения оптимальной последовательности расчета аппаратов ХТС и т. д.

Система $\langle P, G, S \rangle \in \bar{C}$ составляет функциональную среду (программные ресурсы) системы C . По существу, это прикладное математическое обеспечение (см. рис. 4.7).

Аппарат управления элементами F, P, G, S посредством перевода внутреннего языка системы в операторы машинного языка составляет интерпретатор I . Входной информацией для интерпретатора являются номера метаалгоритмов i , номера файлов j , номера записей файлов k и значения диалогового предиката $m = \{0,1\}$. Интерпретатор I выполняет следующие функции: $I^1(i) = S_i$ — вызывает требуемый метаалгоритм; $I^2(j, k) = d_{jk}^F$ — вызывает требуемую запись файла, $I^3(m) = m$ — осуществляет вычисление диалогового предиката.

Транслятор T осуществляет отображение предложения L входного языка системы (Е-языка) в совокупность интерпретирующих функций и их аргументов: $T: L \rightarrow \{(I^1, i), (I^2, j, k), (I^3, m)\}$.

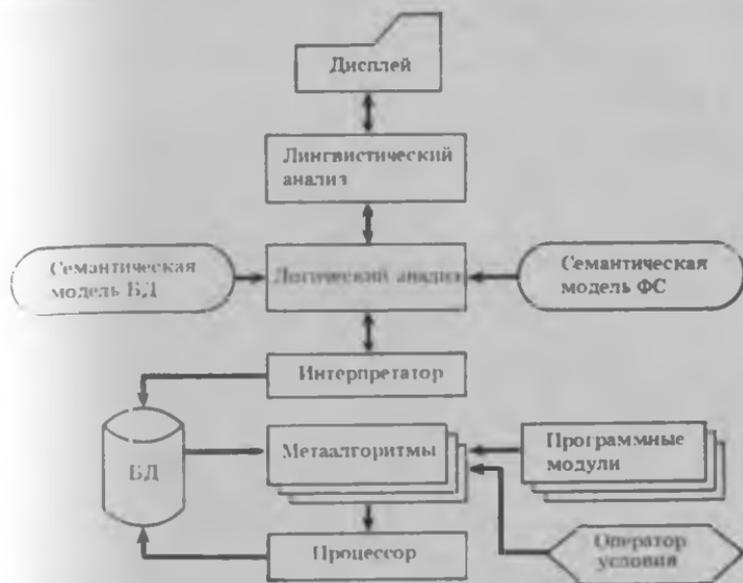


Рис. 4.21. Структурная схема диалоговой системы автоматизированного проектирования

В соответствии с введенным определением структурная схема системы приведена на рис. 4.21. Она состоит из подсистемы проектирования (анализа и синтеза ХТС), включающей функциональную среду (ФС) и банк данных (БД), и подсистемы диалогового взаимодействия, включающей семантические модели БД и ФС, блоки лингвистического и логического анализа. Связь между подсистемами осуществляется на уровне интерпретатора I , ввод-вывод происходит посредством дисплея. Блок лингвистического анализа выполняет обработку входного Е-предложения, а блок логического анализа предназначен для управления семантическими моделями БД и ФС.

Важнейшая задача обеспечения диалогового взаимодействия в рамках системы S состоит в реализации функций трапслятора T . Основная идея подхода к решению этой задачи заключается в использовании семантических моделей БД и ФС, построенных на основе использования теории фреймов.

Семантические модели БД и ФС представляют собой совокупности соответствующих фреймов. В данном случае фрейм подсистемы взаимодействия отражает свойства и функции объектов подсистемы проектирования элементарными средствами Е-языка и служит посредником между Е-предложением и семантически эквивалентной ему входной информацией интерпретатора.

Рассмотрим формальные определения фреймов различных элементов системы. Фреймом БД называется структура типа

$$\Phi = l (P_1, \dots, P_n), \quad (4.84)$$

где E -лексема, l — имя объекта БД; P — терминал либо фрейм. Терминал определяется как $t = \{l, \Omega\}$, где l — имя элементарного объекта БД; Ω — область возможных значений объекта. Экземпляром фрейма БД является структура $t^\Phi = \{\Phi, t_1, \dots, t_n\}$, в которой каждому терминалу задан экземпляр (значение). Примером фрейма ФС, оформленным с помощью скобочной записи, для понятия БД «Аппарат» может быть запись вида

Аппарат

((номер = J_1)

(тип = J_2)

(потoki (входные (количество = J_1) (номера = J_1))

(выходные (количество = J_1) (номера = J_1)))

(параметры (технологические (список = J_3) (значение = J_4)

(единицы измерений = J_5))

(конструкционные (список = J_6) (значения = J_4))

(единицы измерения = J_5)))

Областям значений терминалов этого фрейма соответствуют: J_1 — натуральные числа; J_2 — список лексем («реактор», «колонна» и т. д.); J_3 — список лексем («температура», «состав», «давление» и т. д.); J_4 — соответствующее значение параметра; J_5 — список символов («моль/ч», «моль моль», «°С» и т. д.); J_6 — список лексем («высота», «объем» и т. д.).

Фреймом ФС называется структура типа

$$\Phi = g (\Phi^1, \Phi^2, S_1), \quad (4.85)$$

где g — идентификатор метаалгоритма; Φ^1 — совокупность фреймов БД, соответствующих входным данным метаалгоритма; Φ^2 — совокупность фреймов БД соответствующих выходным данным метаалгоритма; S_1 — подструктура синтаксического оформления вызова ФС. Подструктура S_1 определяется как

$$S_i = t^c (E, M),$$

где t^c — элемент множества предикативных E -лексем; M — совокупность E -лексем, являющихся характеристиками объектов подсистемы проектирования; E — совокупность вида (L^D, λ) , где L^D — множество E -лексем, соответствующих именам вершин структур фреймов БД; λ — признак синтаксической роли лексем $l^D \in L^D$ во входном предложении пользователя. Схема фрейма метаалгоритма «Расчет аппарата» приведена на рис. 4.22. Основное назначение фрейма ФС сводится к обеспечению необходимой информацией функций логического анализа, связанных с иденти-

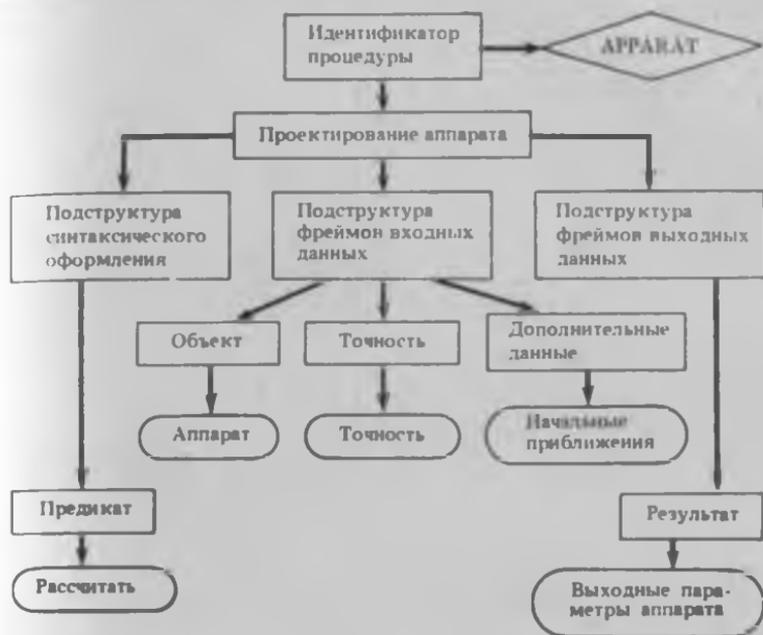


Рис. 4.22. Схема фрейма функциональной среды

фикацией метаалгоритма ФС, семантически эквивалентного заданию пользователя, с формированием набора входных данных, пересылкой результатов вычислений в БД. На рисунке отражена информация фрейма для каждой из этих функций (в прямоугольниках), указаны имена фреймов БД, требующих обработки данной функцией блока логического анализа (в эллипсах) и Е-лексема, присутствие которых необходимо во входном предложении пользователя.

Общая схема диалогового взаимодействия и роль фреймов БД и ФС в этом взаимодействии приведена на рис. 4.23. Как видно из рисунка, инициатива ведения диалога принадлежит пользователю и сводится к формированию задания в виде Е-предложения. Анализ входного предложения в соответствии со структурой семантической модели ФС, начинающийся с выделения предиката, позволяет получить список конкретных фреймов метаалгоритмов, семантически подобных заданию пользователя. Идентификация одного из них системой невозможна ввиду отсутствия необходимой информации во входном предложении и представляется пользователю. Анализ подструктуры входных данных выделенного фрейма метаалгоритма приводит к серии запросов на ввод недостающих в БД входных данных метаалгоритма. Полностью сформированный экземпляр фрейма ФС дает возмож-

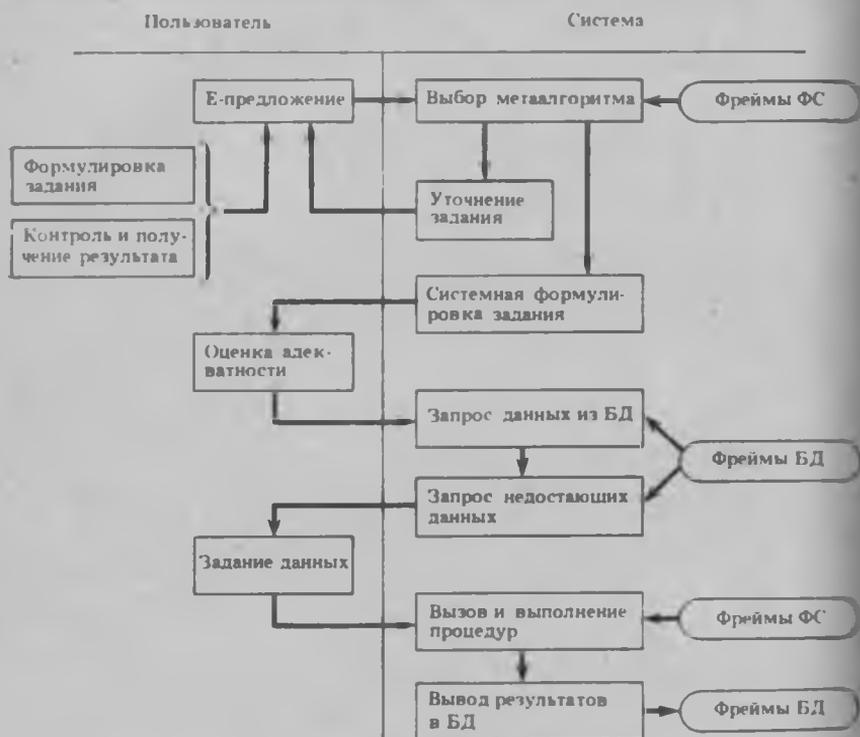


Рис. 4.23. Общая схема диалогового взаимодействия

ность выполнить программные модули найденного метаалгоритма. Результаты расчета передаются в БД в соответствии со структурой выходных данных фрейма метаалгоритма.

4.4. Принципы построения систем автоматизированного проектирования

Разработка САПР является сложной организационно-математической проблемой, решение которой под силу только коллективу специалистов из различных областей науки и техники. Различные элементы (подсистемы) настолько специфичны, что необходима постоянная координация усилий как в области идеологии построения системы, так и в вопросах согласования терминологии, средств и способов программирования, выбора технических средств и т. д. Очевидно, речь должна идти не о механизации трудоемких операций по изготовлению документации, подбору спецификаций и т. п., а об автоматизации проектирования на базе современных методов вычислительной математики, теорети-

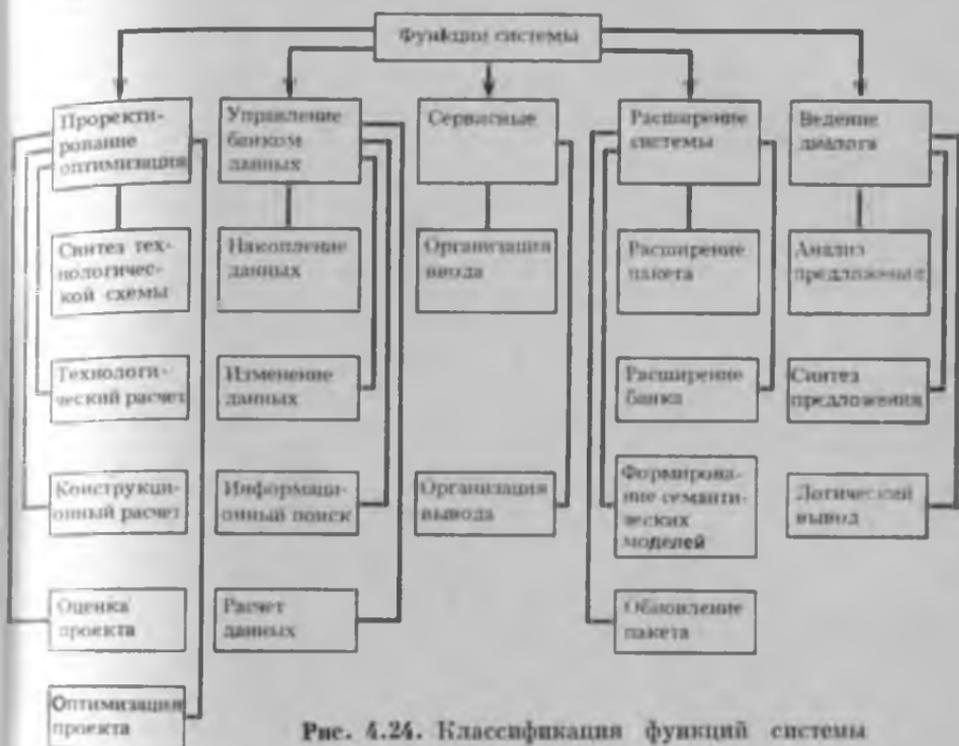


Рис. 4.24. Классификация функций системы

ческой проработке отдельных вопросов проектирования с использованием развитого прикладного математического обеспечения. С целью централизации и объединения усилий отдельных разработчиков САПР целесообразно исходить из определенных принципов, отражающих области приложения, эффективность САПР и ускоряющих процесс их разработки.

САПР является многофункциональным программно-техническим комплексом (рис. 4.24), однако центральное место в классификации функций занимает непосредственно проектирование. Все остальные функции порождены алгоритмами расчета конкретных процессов и служат для повышения их эффективности и управления. Например, функции управления БД представляют пользователю такие возможности, как оперативное изменение параметров, получение справок, накопление альтернативных вариантов решений и т. п. Сервисные функции позволяют быстро и правильно вводить информацию, получать результаты требуемой формы. Функции расширения позволяют в интерактивном режиме вводить новые программные модули и форматы данных, адаптировать их к уже имеющимся структурам, создавая семантические модели. Диалоговые функции позволяют реализовать взаимодействие на естественном языке, расширить вычислительные возможности системы за счет активного участия пользователя

в процессе проектирования, автоматизировать процесс построения метаалгоритмов.

Принципы структурного программирования. Для сокращения трудозатрат и сроков реализации, а также применения в максимально широкой области в основу разработки САПР необходимо закладывать принципы структурного программирования [92, 93]. К их числу относятся принципы модульности, открытости и универсальности. В соответствии с первым из них системное и прикладное обеспечение строится в виде отдельных независимых модулей, разработка которых возможна различными группами специалистов. Группа модулей, относительно независимых, но связанных единым критерием функционирования, составляет подсистему (подсистемы информационного обеспечения, технологического расчета единиц оборудования и т. д.). Реализация этого принципа предполагает наличие в системе централизованного БД и обмен информацией между подсистемами с помощью соответствующей СУБД.

Среди модулей, соответствующих моделям аппаратов, выделяются четыре типа иерархии общности: узкоспециализированные; специализированные; широкоспециализированные и общие. Использование общих модулей аппаратов и независимых модулей структурного анализа ХТС позволяет реализовать принцип универсальности системы. Этот принцип также подтверждается ориентацией САПР на решение задач группы родственных по характеру работы технологических объектов.

При проектировании системы практически невозможно учесть все особенности конкретных ХТС. В связи с этим принцип открытости системы позволяет приспособить «универсальную» САПР для решения конкретной задачи путем введения дополнительных узкоспециализированных модулей.

Ориентация на массового пользователя. Этот принцип означает, что средства системы организованы таким образом, чтобы максимально облегчить процесс взаимодействия с системой пользователя-непрофессионала в области вычислительной техники. При этом имеется в виду, что процесс взаимодействия включает этапы изучения пользователем системы и решение поставленной задачи.

Основным критерием эффективности системы с точки зрения процесса изучения является минимум затраченного времени. Это может быть достигнуто за счет отсутствия формального описания средств системы и максимального совмещения процессов решения задачи и обучения.

В свою очередь критерием эффективности процесса решения является минимальный объем знаний о структуре и составе системы, необходимый для постановки и решения задачи в рамках интерактивного взаимодействия. Дополнительным критерием является минимальный объем информации, вводимой в систему

и полностью определяющей поставленную задачу. Последние два критерия, как правило, противоречивы. Поэтому для обеспечения эффективности процесса решения и выполнения обоих критериев приходится допускать некоторые компромиссы.

Критерий минимума знаний обеспечивается следующими средствами: автоматическим построением алгоритмов решения задачи, от пользователя требуется лишь постановка задачи; отсутствием неопределенностей при обработке заданий; контролем за полнотой и правильностью представленной информации со стороны системы и способностью рассчитывать недостающие данные; способностью системы автоматически вносить изменения в алгоритм решения частных подзадач.

Критерий минимума вводимых данных может достигаться исключением их дублирования и использованием базы данных как источника информации для подсистем.

Функциональная полнота системы. Этот принцип означает, что в рамках конкретной предметной области система обеспечивает выполнение требований пользователя, связанных с вычислениями, а также накоплением и обработкой информации.

Обеспечение принципа функциональной полноты достигается за счет совершенства математического обеспечения. Последнее должно базироваться на развитых и проверенных алгоритмах и программах расчета как отдельных аппаратов, так и всего производства. Адаптация существующих программных модулей к средствам системы должна производиться без существенной реконструкции. Желательно, чтобы пользователь имел возможность расширения функциональных возможностей системы.

Реализация минимальными средствами. Этот принцип означает, что, во-первых, построение САИР возможно в рамках стандартного математического обеспечения ЭВМ серии ЕС, СМ и т. д. с учетом наличия трансляторов с языков программирования, средств связи программных модулей и терминальных устройств. Во-вторых, средства системы, обеспечивающие принципы функциональной полноты и ориентации на массового пользователя, должны базироваться на теории, позволяющей достаточно простым способом реализовать необходимый минимум этих средств. Это требование обусловлено второстепенной ролью интерактивного взаимодействия по отношению к моделирующим алгоритмам и предполагаемой достаточностью минимального объема языковых средств системы в рамках процесса проектирования.

Оперативность взаимодействия пользователя с системой. Этот принцип предполагает наличие простого для освоения и развитого языка взаимодействия.

Взаимосвязь принципов разработки системы и средств, обеспечивающих их выполнение, приведена на рис. 4.25.

Таким образом, исходя из указанных принципов, разработка диалоговой системы проектирования химических производств

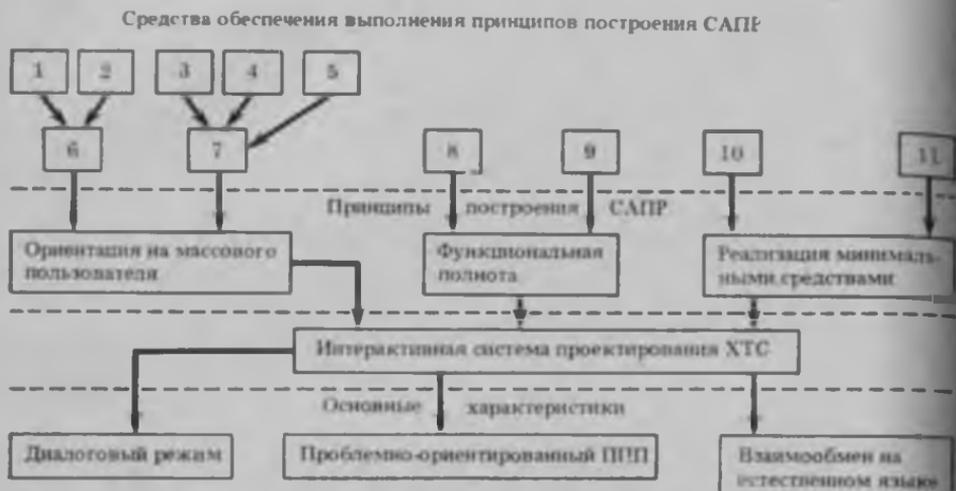


Рис. 4.25. Принципы построения САПР

1 — совмещение процессов решения задачи и изучения системы; 2 — отсутствие формального описания; 3 — системные «знания» функциональных возможностей; 4 — автоматизация построения алгоритма; 5 — контроль информации взаимодействия; 6 — минимум времени обучения; 7 — минимум сведения о системе; 8 — преемственность математического обеспечения; 9 — открытость системы; 10 — стандартный состав ОС ЭВМ; 11 — практически приемлемая теория

должна проводиться на основе триединого подхода, а именно: выбора технических средств реализации системы, разработки структуры организации прикладного математического обеспечения, обеспечения диалогового взаимодействия пользователя с системой.

Решение двух первых проблем является содержанием гл. 6 и 7.

4.5. Экономическая эффективность систем автоматизированного проектирования

К системам проектирования предъявляется ряд требований, обеспечивающих их эффективность. Это удобство и простота эксплуатации, высокий уровень решения проектных задач, достоверность получаемых результатов и т. д. В большинстве своем эффективность САПР оценивается качественно по целому ряду весьма специфических критериев. В целом же она зависит от величины капитальных и текущих затрат, а также экономии, образующейся в результате использования системы. Если первые два фактора оценки эффективности (затраты) вполне определяемы по соответствующим методикам, то последний (экономия) существенно зависит от специфических условий эксплуатации.

В качестве других критериев эффективности САПР используются параметры, характеризующие непосредственно технические, структурные и потребительские показатели. Это физическая надежность самой системы и надежность результатов расчета, быстрдействие в получении решения, частота использования системы и ее универсальность.

В соответствии с общепромышленными методическими материалами [94] предложено оценивать эффективность использования САПР по трем аспектам, а именно: в сфере проектирования — сокращением сроков, снижением трудоемкости проектирования и, как следствие, повышением эффективности деятельности проектных и изыскательских организаций; в сфере изготовления объектов, спроектированных средствами САПР, — повышением качества проектной документации и лучших проектных решений, сокращением сроков строительства, экономией трудозатрат, материалов, энергии и других ресурсов; в сфере эксплуатации объектов, спроектированных средствами САПР, — повышением их технико-экономических характеристик (снижением эксплуатационных расходов, повышением эффективности использования).

Соответственно экономическая эффективность САПР выражается совокупностью показателей, позволяющих количественно характеризовать составляющие эффективности, а именно: показателями экономической эффективности собственно САПР как одного из видов новой техники; показателями влияния САПР на деятельность проектной и технологической организаций; показателями влияния САПР на качество проектных решений. При этом методической основой анализа эффективности является сравнение экономических результатов использования оцениваемой САПР и лучшего из имеющихся или заменяемого способа проектирования.

Поскольку оценка экономической эффективности САПР производится на основе сравнения, то выбор базового способа проектирования является ключевой задачей, определяющей в конечном счете достоверность получаемых результатов. В качестве такового на первом этапе (предпроектные исследования и разработка технического задания) выбирается наиболее передовая организация или прогнозируемые показатели конкретной организации, на втором этапе (разработка технического и рабочего проектов) выбирается лучший существующий способ выполнения каждой из рассматриваемых процедур проектирования или плановые показатели заменяемого способа выполнения задач проектирования, на третьем этапе (ввод в действие и промышленное функционирование САПР) принимаются плановые или отчетные показатели организации при выполнении каждой из рассматриваемых процедур проектирования.

Годовой экономический эффект представляет собой суммарную экономию всех производственных ресурсов (живого труда,

материалов, энергии, капитальных вложений), которую получает народное хозяйство в результате использования САПР, строительства и эксплуатации объектов, спроектированных с помощью САПР.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кафаров В. В. Принципы создания безотходных химических производств. М.: Химия, 1982. 288 с.
2. Андрианов А. П., Задыгайло П. Б., Мямлин А. П., Поздняков Л. А. Тенденции в развитии суперЭВМ. Комплексный подход к проектированию суперЭВМ // Прикладная информатика. М.: Финансы и статистика, 1983. Вып. 1. С. 183—197.
3. Hartvany J., Neuman W. M., Sabin M. A. World survey of computer-aided design // Comput.-Aided Design. 1977. Vol. 9, N 2. P. 79—107.
4. Кафаров В. В., Мешалкин В. П., Перов В. Л. Математические основы автоматизирующего проектирования химических производств. М.: Химия, 1979. 320 с.
5. Dugundji J., Ugi I. An algebraic model of constitutional chemistry as a basis for chemical computer program // Top. Curr. Chem. 1973. Vol. 39. P. 19—64.
6. Agnihotri R. B., Motard R. L. Reaction path synthesis in industrial chemistry // Comput. Appl. Chem. Eng. ACS Symp. Ser. 1980. Vol. 124. P. 193—206.
7. Hendrickson J. B. Systematic synthesis design // J. Amer. Chem. Soc. 1975. Vol. 97, N 20. P. 5763—5784; 5784—5800.
8. Hendrickson J. B. A systematic characterization of structures and reactions for use in organic chemistry // Ibid. 1971. Vol. 93, N 25. P. 6847—6854.
9. Писаренко В. П., Жукова Т. Б., Кафаров В. В. Макрокинетика химических реакций. М.: МХТИ, 1983. 80 с.
10. Кафаров В. В., Жерновая И. М. Моделирование химических реакторов // Итоги науки и техники. Процессы и аппараты химической технологии. М.: ВИНТИ, 1980. Т. 8. С. 3—76.
11. Писаренко В. П. Идентификация математических моделей химических реакторов // Итоги науки и техники. Процессы и аппараты химической технологии. М.: ВИНТИ, 1981. Т. 9. С. 3—86.
12. Danziger R. Distillation columns with vapor recompression // Chem. Eng. Progr. 1979. Vol. 75, N 9. P. 58—64.
13. Shell W. J. Membrane use / technology growing // Hydrocarbon Proc. 1983. N 8. P. 43—46.
14. Maclean D. L., Stookey D. J., Metzger T. R. Fundamentals of gas permeation // Ibid. P. 47—51.
15. Hörmeyer H. Calculation of crystallization equilibria // Ger. Chem. Eng. 1983. Vol. 6. P. 277—281.
16. Matsuoka M. Combined crystallization process to separate binary organic eutectic mixtures // J. Chem. Eng. Jap. 1983. Vol. 16, N 5. P. 433—435.
17. Кафаров В. В., Дорохов И. П., Кольцова Э. М. Системный анализ процессов химической технологии: Процессы массовой кристаллизации из растворов и газовой фазы. М.: Наука, 1983. 488 с.
18. Humprey J. L., Fair J. R. Low-energy separation for the process industry // Separ. Sci. and Technol. 1983. Vol. 18. P. 1765—1789.
19. Холланд Ч. Д. Многокомпонентная ректификация. М.: Химия, 1969. 347 с.
20. Хачкурузов Г. А. Основы общей и химической термодинамики. М.: Высш. шк., 1979. 268 с.
21. Коган В. Б. Гетерогенные равновесия. Л.: Химия, 1968. 432 с.

21. Wilson G. M. Vapor-liquid equilibrium: A new expretion for the excess free energy of mixing // J. Amer. Chem. Soc. 1964. Vol. 86. № 2. P. 127 — 130.
22. Renon H., Prausnitz J. M. Local composition in thermodynamic excess functions for liquid mixtures // AIChE Journal. 1968. Vol. 14, N 1. P. 135—144.
23. Прауэниц Дж. М. Машинный метод расчета парожидкостного равновесия многокомпонентных смесей. М.: Химия, 1971. 216 с.
24. Бродянский В. М. Эксергетический метод термодинамического анализа. М.: Энергия, 1973. 296 с.
25. Rodriguez L. Calculation of available energy quantities // ACS Symp. Ser. 1980. Vol. 122. P. 15—38.
26. Кафаров В. В., Перов В. Л., Бобров Д. А., Иванова О. В. Метод выбора оптимальной структуры тепловых подсистем химических производств на основе термодинамического принципа // Докл. АН СССР. 1978. Т. 239, № 2. С. 398—400.
27. Naka Y., Baba K. A. Thermodynamic approach to distillation system design for energy conservation // Proc. 3rd Pasif. Chem. Eng. Congr. Seoul. 1983. May. Vol. 3. P. 409—414.
28. Чайцевец П. С., Майков В. П., Усикин И. П. Исследование связи термодинамических и технико-экономических критериев оптимизации в ректификационных системах, разделяющих идеальные смеси // ТОХТ. 1977. Т. 11. № 11. С. 598—605.
29. Кафаров В. В., Перов В. Л., Иванов В. А., Бобров Д. А. Системный подход к оптимальному проектированию ХТС // ТОХТ. 1972. Т. 6, № 6. С. 908—913.
30. Кафаров В. В., Перов В. Л., Иванов В. А., Бобров Д. А. Декомпозиция ХТС с произвольной структурой // Докл. АН СССР. 1972. Т. 207, № 1. С. 142—145.
31. Гордеев Л. С., Кафаров В. В., Бояринов А. И. Оптимизация процессов химической технологии. М.: МХТИ, 1972. 257 с.
32. Цилин С. В., Кафаров В. В., Бобров Д. А. Топологический метод термодинамического анализа сложных энерготехнологических систем // ТОХТ. 1985. Т. 10. № 4. С. 525—532.
33. Nishida N., Liu Y. A., Lapidus L. Studies in chemical process design and synthesis // AIChE Journal. 1977. Vol. 23, N 1. P. 77—93.
34. Кафаров В. В., Ветозин В. И. Основы построения операционных систем и химической технологии. М.: Наука, 1980. 430 с.
35. Олме Т. В. Предложения КОДАСИЛ по управлению базами данных. М.: Финансы и статистика, 1981. 286 с.
36. Мартин Д. Организация баз данных в вычислительных системах. М.: Мир, 1978. 564 с.
37. Кафаров В. В., Бояринов А. П., Ветозин В. И., Гартман Т. И. Термодинамическая проверка и исправление опытных равновесных данных жидкость—пар в бинарных системах // ЖФХ. 1972. Т. 66, № 9. С. 2233—2237.
38. Roze L. M., Nyka J. Analysis of operating distillation column data // Ind. and Eng. Chem. Proc. Des. and Develop. 1984. Vol. 23, N 3. P. 429—437.
39. Silverman N., Tassios D. Prediction of multicomponent VLE with Wilson equation: Effect of the minimization function and of the quality of binary data // Ibid. P. 586—589.
40. Кафаров В. В., Дорохов И. И. Системный анализ процессов химической технологии: Основы стратегии. М.: Наука, 1976. 500 с.
41. Бояринов А. И., Кафаров В. В. Методы оптимизации в химической технологии. М.: Химия, 1975. 576 с.
42. Каневец Г. Е. Обобщенные методы расчета теплообменников. Киев: Наук. думка, 1979. 352 с.

44. Кафаров В. В., Ветохин В. Н., Чузунов А. М. Новый метод проектного расчета ректификационной установки // Докл. АН СССР. 1979. Т. 246, № 1. С. 160—163.
45. Кафаров В. В., Бояринов А. И., Ветохин В. Н. Разделительная способность тарелок в колоннах многокомпонентной ректификации // 1972. Т. 202, № 5. С. 1143—1146.
46. Бояринов А. И. Новые принципы расчета колонн ректификации и их комплексов: Дис. ... д-ра техн. наук. М.: МХТИ, 1972.
47. Кафаров В. В., Ветохин В. Н., Потапов В. И. Декомпозиционный метод расчета технологических схем выделения целевых продуктов // Нав. вузов. Химия и хим. технология. 1984. Т. 27, Вып. 4. С. 470—474.
48. Brerley R. J., Smith R. Dispack-using a combination of algorithms and absorption problems // 3rd Intern. Symp. Distillation. L., 1979. P. 2.6/89—2.6/94.
49. Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: Химия, 1985. 448 с.
50. Кафаров В. В., Винаров А. Ю., Гордеев Л. С. Моделирование биохимических реакторов. М.: Лесн. пром-сть, 1979. 342 с.
51. Сташишкис Ю. Оптимальное управление биотехнологическими процессами. Вильнюс: Мокслас, 1984. 256 с.
52. Nishida N., Stephanopoulos G., Westerberg A. W. A review of process synthesis // AIChE Journal. 1981. Vol. 27, N 3. P. 321—351.
53. Островский Г. М., Волин Ю. М. Методы оптимизации СХТС. М.: Химия, 1970. 328 с.
54. Островский Г. М., Бережинский Т. А., Беллева А. Р. Алгоритмы оптимизации ХТП. М.: Химия, 1978. 293 с.
55. Ортега Дж., Рейнболт К. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М.: Мир, 1975. 560 с.
56. Broyden G. G. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations // Math. Comput. 1965. Vol. 19, N. 3. P. 577—593.
57. Mohalec V., Motard R. L. Evolutionary search for an optimal limiting process flowsheet // Comp. and Chem. Eng. 1977. Vol. 1. P. 149—160.
58. Madona L. A. Energy flow in networks // Thermochem. acta. 1979. Vol. 32. P. 189—203.
59. Кафаров В. В., Бояринов А. И., Новиков А. И., Ветохин В. Н. Моделирование ректификационных установок в системе автоматизированного проектирования ХТП // Нефтепереработка и нефтехимия. 1975. Вып. 9. С. 81—103.
60. Evans I. B., Boston J. F., Britt H. I. et al. ASPEN: An advanced system for process engineering // Comp. and Chem. Eng. 1979. Vol. 3, N 1/4. P. 319—327.
61. Золотарев В. В. Разработка и применение автоматизированной системы анализа и синтеза ХТС: Автореф. дис. ... канд. техн. наук. М.: МХТИ, 1980. 23 с.
62. Кляцес А. С. Представление знаний // Прикл. информатика. 1983. Вып. 1. С. 49—94.
63. Попов Э. В., Фридман Г. Р. Алгоритмические основы интеллектуальных роботов и искусственного интеллекта. М.: Наука, 1976. 455 с.
64. Кузин Л. Т. Интеллектуальные банки данных // Вопросы кибернетики. М.: Научн. совет по комплексной пробл. «Кибернетика» АН СССР, 1979. С. 3—11.
65. Гладун В. П., Ващенко Н. Д. Методы формирования понятий на ЭВМ // Кибернетика. 1975. № 2. С. 107—122.
66. Codd E. F. Relational model for large shared data bank // Commun. ACM. 1970. Vol. 13, N 6. P. 377—387.
67. Жолондзь В. Я. Особенности реализации ситуационного метода управления специальным автотранспортом: Тр. Респ. ИТК по средствам автоматизации и системам управления. Севастополь, 1972. С. 194.

68. *Myloropoulos J.*, et al. Semantic networks and the generation of context // Adv. Pap. IV Intern. Joint. Congr. Artificial Intelligence. 1975. Vol. 1, N 1. P. 134—142.
69. *Минский М.* Фреймы для представления знаний. М.: Энергия. 1979. 151 с.
70. *Ветохин В. Н., Положенцев В. И.* Диалоговое взаимодействие в автоматизированной системе моделирования ХТС. М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1981. С. 52—60.
71. *Кузин Л. Т., Дубинина В. Г.* Интеллектуальная система проектирования сетей ЭВМ // Проектирование интеллектуальных систем. М.: Атомиздат, 1980. С. 62—67.
72. *Положенцев В. И.* Разработка диалоговой системы моделирования СХТС: Дис. ... канд. техн. наук. М.: МХТИ, 1982. 250 с.
73. *Уинстон П.* Искусственный интеллект. М.: Мир, 1980. 519 с.
74. *Тогугу Э. Х.* Генератор программ в модульной системе программирования // Кибернетика. 1974. № 6. С. 74—78.
75. *Пилльсон П.* Искусственный интеллект. М.: Мир, 1973. 270 с.
76. *Кокун Л. М.* Семантические сети как средство представления информации // Эвристические модели в психологии и социологии. Киев: Научн. совет по пробл. «Кибернетика» АН УССР. 1975. С. 17—21.
77. Фактографические системы информационного обеспечения. Киев: О-во «Знання», 1976. 28 с.
78. *Jones P. F.* Four principles of monocomputer dialogue // Comput.-Aided Design. 1978. Vol. 10, N 2. P. 197—202.
79. *Сенин Г. В.* Взаимодействие с базой на естественном языке. М.: Науч. совет по комплексной пробл. «Кибернетика» АН СССР. 1977. 14 с. Препр.
80. *Weizenbaum J.* ELIZA—A computer program for the study of natural language communications between man and machine // Commun. ACM. 1966. Vol. 9, N 4. P. 474—489.
81. *Черкопе Н., Шуберт Л.* К вопросу о семантическом представлении состояния // Тр. IV Междунар. объединен. конф. по искусств. интеллекту. М.: Наука. 1975. С. 90—96.
82. *Хант Э.* Искусственный интеллект. М.: Мир, 1978. 558 с.
83. *Woods W.* Transitional networks for natural language analysis // Commun. ACM. 1970. Vol. 13, N 10. P. 591—606.
84. *Глушков В. М., Цейтлин Г. Е., Ющенко Е. Я.* Алгебра. Языки. Программирование. Киев: Наук. думка, 1978. 318 с.
85. Диалоговые системы в управлении, проектировании и обучении. // Тр. МЭИ. Вып. 485. 1980. 94 с.
86. *Гинсбург С.* Математическая теория контекстно-свободных языков. М.: Мир, 1970. 326 с.
87. *Виноград Т.* Программа, понимающая естественный язык. М.: Мир, 1976. 294 с.
88. *Шенк Р.* Обработка концептуальной информации. М.: Энергия, 1980. 360 с.
89. *Кулазина О. С.* Исследование по машинному переводу. М.: Наука, 1979. 320 с.
90. *Ветохин В. П., Положенцев В. И.* Язык взаимодействия с интерактивной системой моделирования СХТС. Деп. 2036(80), ВИНТИИ, Деп. рук. № 9, б/о 369, 1980. 11 с.
91. *Кафаров В. В., Ветохин В. Н., Положенцев В. И.* Обеспечение диалогового взаимодействия в операционных системах химической технологии // Докл. АН СССР. 1982. Т. 262, № 1. С. 150—154.
92. *Дейкстра Э.* Дисциплина программирования. М.: Мир, 1978. 274 с.
93. *Лордан Э.* Структурное программирование и конструирование программ. М.: Мир, 1979. 415 с.

44. Кафаров В. В., Ветозин В. Н., Чугунов А. М. Новый метод проектного расчета ректификационной установки // Докл. АН СССР. 1979. Т. 246, № 1. С. 160—163.
45. Кафаров В. В., Бояринов А. И., Ветозин В. Н. Разделительная способность тарелок в колоннах многокомпонентной ректификации // 1972. Т. 202, № 5. С. 1143—1146.
46. Бояринов А. И. Новые принципы расчета колонн ректификации и их комплексов: Дис. ... д-ра техн. наук. М.: МХТИ, 1972.
47. Кафаров В. В., Ветозин В. Н., Потапов В. И. Декомпозиционный метод расчета технологических схем выделения целевых продуктов // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 1984. Т. 27, Вып. 4. С. 470—474.
48. Brerley R. J., Smith R. Dispack-using a combination of algorithms and absorption problems // 3rd Intern. Symp. Distillation. L., 1979. P. 2.6/89—2.6/94.
49. Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: Химия, 1985. 448 с.
50. Кафаров В. В., Винаров А. Ю., Гордеев Л. С. Моделирование биохимических реакторов. М.: Лесн. пром-сть, 1979. 342 с.
51. Станицыкис Ю. Оптимальное управление биотехнологическими процессами. Вильнюс: Мокслас, 1984. 256 с.
52. Nishida N., Stephanopoulos G., Westerberg A. W. A review of process synthesis // AIChE Journal. 1981. Vol. 27, N 3. P. 321—351.
53. Островский Г. М., Волин Ю. М. Методы оптимизации СХТС. М.: Химия, 1970. 328 с.
54. Островский Г. М., Бережинский Т. А., Беллева А. Р. Алгоритмы оптимизации ХТП. М.: Химия, 1978. 293 с.
55. Ортега Дж., Рейнболт К. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М.: Мир, 1975. 560 с.
56. Broyden G. G. A class of methods for solving nonlinear simultaneous equations // Math. Comput. 1965. Vol. 19, N. 3. P. 577—593.
57. Mohalec V., Motard R. L. Evolutionary search for an optimal limiting process flowsheet // Comp. and Chem. Eng. 1977. Vol. 1. P. 149—160.
58. Madona L. A. Energy flow in networks // Thermochim. acta. 1979. Vol. 32. P. 189—203.
59. Кафаров В. В., Бояринов А. И., Новиков А. И., Ветозин В. Н. Моделирование ректификационных установок в системе автоматизированного проектирования ХТП // Нефтепереработка и нефтехимия. 1975. Вып. 9. С. 81—103.
60. Evans I. B., Boston J. F., Britt H. I. et al. ASPEN: An advanced system for process engineering // Comp. and Chem. Eng. 1979. Vol. 3, N 1/4. P. 319—327.
61. Золотарев В. В. Разработка и применение автоматизированной системы анализа и синтеза ХТС: Автореф. дис. ... канд. техн. наук. М.: МХТИ, 1980. 23 с.
62. Клецков А. С. Представление знаний // Прикл. информатика. 1983. Вып. 1. С. 49—94.
63. Попов Э. В., Фридман Г. Р. Алгоритмические основы интеллектуальных роботов и искусственного интеллекта. М.: Наука, 1976. 455 с.
64. Кузин Л. Т. Интеллектуальные банки данных // Вопросы кибернетики. М.: Научн. совет по комплексной пробл. «Кибернетика» АН СССР, 1979. С. 3—11.
65. Гладун В. П., Ващенко Н. Д. Методы формирования понятий на ЭВМ // Кибернетика. 1975. № 2. С. 107—122.
66. Codd E. F. Relational model for large shared data bank // Commun. ACM. 1970. Vol. 13, N 6. P. 377—387.
67. Жолондзь В. Я. Особенности реализации ситуационного метода управления специальным автотранспортом: Тр. Респ. ИТК по средствам автоматизации и системам управления. Севастополь, 1972. С. 194.

68. *Myloropoulos J. et al.* Semantic networks and the generation of context // Adv. Pap. IV Intern. Joint. Congr. Artificial Intelligence. 1975. Vol. 1, N 1. P. 134—142.
69. *Минский М.* Фреймы для представления знаний. М.: Энергия. 1979. 151 с.
70. *Ветохин В. Н., Положенцев В. И.* Диалоговое взаимодействие в автоматизированной системе моделирования ХТС. М.: ЦНИИТЭисфтехим, 1981. С. 52—60.
71. *Кузин Л. Т., Дубинина В. Г.* Интеллектуальная система проектирования сетей ЭВМ // Проектирование интеллектуальных систем. М.: Атомиздат, 1980. С. 62—67.
72. *Положенцев В. И.* Разработка диалоговой системы моделирования СХТС: Дис. ... канд. техн. наук. М.: МХТИ, 1982. 250 с.
73. *Уинстон П.* Искусственный интеллект. М.: Мир, 1980. 519 с.
74. *Тогогу Э. Х.* Генератор программ в модульной системе программирования // Кибернетика. 1974. № 6. С. 74—78.
75. *Нильсон П.* Искусственный интеллект. М.: Мир, 1973. 270 с.
76. *Кокун Л. М.* Семантические сети как средство представления информации // Эвристические модели в психологии и социологии. Киев: Научн. совет по пробл. «Кибернетика» АН УССР. 1975. С. 17—21.
77. Фактографические системы информационного обеспечения. Киев: О-во «Знание», 1976. 28 с.
78. *Jones P. F.* Four principles of monocomputer dialogue // Comput.-Aided Design. 1978. Vol. 10, N 2. P. 197—202.
79. *Сенин Г. В.* Взаимодействие с базой на естественном языке. М.: Науч. совет по комплексной пробл. «Кибернетика» АН СССР. 1977. 14 с. Препр.
80. *Weizenbaum J.* ELIZA—A computer program for the study of natural language communications between man and machine // Commun. ACM. 1966. Vol. 9, N 1. P. 474—489.
81. *Черконе Н., Шуберт Л.* К вопросу о семантическом представлении состояния // Тр. IV Междунар. объединен. конф. по искусств. интеллекту. М.: Наука. 1975. С. 90—96.
82. *Хант Э.* Искусственный интеллект. М.: Мир, 1978. 558 с.
83. *Woods W.* Transitional networks for natural language analysis // Commun. ACM. 1970. Vol. 13, N 10. P. 591—606.
84. *Глушков В. М., Цейтлин Г. Е., Юценко Е. Я.* Алгебра. Языки. Программирование. Киев: Наук. думка, 1978. 318 с.
85. Диалоговые системы в управлении, проектировании и обучении. // Тр. МЭИ. Вып. 485. 1980. 94 с.
86. *Гинсбург С.* Математическая теория контекстно-свободных языков. М.: Мир, 1970. 326 с.
87. *Виноград Т.* Программа, понимающая естественный язык. М.: Мир, 1976. 294 с.
88. *Шенк Р.* Обработка концептуальной информации. М.: Энергия, 1980. 360 с.
89. *Кулакина О. С.* Исследование по машинному переводу. М.: Наука, 1979. 320 с.
90. *Ветохин В. Н., Положенцев В. И.* Язык взаимодействия с интерактивной системой моделирования СХТС. Деп. 2036(80), ВИНТИ, Деп. рук. № 9, б/о 369, 1980. 11 с.
91. *Кафаров В. В., Ветохин В. Н., Положенцев В. И.* Обеспечение диалогового взаимодействия в операционных системах химической технологии // Докл. АН СССР. 1982. Т. 262, № 1. С. 150—154.
92. *Дейкстра Э.* Дисциплина программирования. М.: Мир, 1978. 274 с.
93. *Лордан Э.* Структурное программирование и конструирование программ. М.: Мир, 1979. 415 с.

Глава 5

ИНФОРМАЦИОННОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ СИСТЕМ
АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ

Одним из условий успешного функционирования САПР является наличие необходимой информации, в частности данных, характеризующих сырье, целевые продукты, оборудование, энергетику, экономику и т. д. Причем точность этих данных имеет решающее значение для определения параметров процесса нахождения оптимального решения проектной задачи. Совокупность данных, характеризующих проектируемый объект и его место в сфере производства и потребления (физико-химические, термодинамические, свойства веществ, параметры оборудования и технологических схем, показатели эффективности производства и т. д.), составляют и н ф о р м а ц и о н н у ю б а з у С А П Р. Важнейшей особенностью информационной базы системы проектирования является ее полнота, так как отсутствие данных приводит к ситуациям, которые не может разрешить ни система, ни проектировщик.

5.1. Состав и источники данных информационной базы САПР

Для нормальной эксплуатации САПР необходима информация самого различного рода, причем максимально достоверная. По отношению к системе она может быть подразделена на две группы — и с х о д н у ю (в н е ш н ю ю), характеризующую количественно свойства веществ, используемых материалов, источники сырья, целевые продукты, энергетические ресурсы, взаимосвязи производства со смежными отраслями народного хозяйства и т. д., и в н у т р е н н ю ю, получаемую как продукт функционирования САПР. Очевидно, исходные данные полностью определяют все возможности системы, поскольку при наличии ненадежных данных САПР работает, по образному выражению, встречающемуся в американской литературе, по принципу GIGO, что означает «мусор на входе, мусор на выходе». Все это обуславливает то, что вопросам рационального сбора и обработки информации, обеспечения ее достоверности уделяется самое серьезное внимание.

Состав и количество наборов данных (по существу, баз данных) для информационно-справочных систем практически неограничено, поскольку постоянно появляются новые задачи и вместе с ними потребности в новых данных. Для конкретных САПР эти наборы (базы) обычно фиксированы возможностями прикладного математического обеспечения. Функциональная структура САПР (см. гл. 4) определяет и число баз, и количество элементов

данных в базах для подсистем. Для систем технологического проектирования исходная информация достаточно однородная и связана с различного рода данными, характеризующими свойства перерабатываемых продуктов, оборудование, параметры моделей. Другого рода информация связана с функционированием промышленных организаций и предназначена для принятия решений на различных уровнях руководства. Сюда относятся данные, связанные с динамикой текущего и перспективного планирования: тенденции развития рынков сбыта, распределение сырья, изменение цен, сведения от поставщиков, выбор направлений исследований, финансирование основных изделий и т. д. Источниками получения информации при этом являются документы различного рода, в том числе управленческая документация (сводки, наряды, учетные ведомости, плановые установки и т. д.).

Сбор информации тесно переплетается с проблемой ее классификации. Поступающие данные могут охватывать очень широкий круг понятий. Система обработки может функционировать лишь при условии, что все эти понятия однозначно классифицированы, так что данные, относящиеся к одному и тому же явлению, будут связаны именно с этим явлением. Значит, на этапе предварительной проработки необходимо четко определить однозначность понятий для каждого из свойств согласованием между различными пользователями системы и определить объем необходимых данных для конкретного приложения.

Основными данными при решении задач технологического проектирования и оптимизации являются физико-химические и теплофизические данные. Они обычно представляются в трех формах — в виде таблиц, диаграмм и уравнений. Наиболее распространенным способом все-таки является аналитическое представление, допускающее непосредственный расчет соответствующих параметров при заданных входных условиях. В химической технологии, особенно для целей проектирования, к наиболее распространенным данным обычно относятся: давление пара, теплота испарения, удельная теплоемкость, плотность, теплопроводность, вязкость, теплота реакций, данные по пожаробезопасности, поверхностное натяжение, фазовое равновесие (жидкость—пар, жидкость—жидкость, жидкость—жидкость—пар, жидкость—твердое вещество, твердое вещество—пар, растворимость), кинетика реакций химического превращения, полимеризации, растворимости и т. д.

Ясно, что эти данные необходимы в требуемом диапазоне по температуре и давлению.

Имеется два источника для заполнения информационной базы САПР. Это экспериментальные и расчетные данные. По степени достоверности предпочтение обычно отдается экспериментальным данным, особенно если эксперимент проводится целенаправленно, т. е. с учетом области применения результата.

Использование литературных данных по свойствам не всегда представляется возможным из-за специфических условий проведения эксперимента и ограниченности интервала по температуре, давлению, составу и другим параметрам. К тому же часто отсутствует достоверная информация о точности публикуемых данных. Поэтому не лишена оснований оценка таких данных, выраженная в работе [1]: «Более половины данных по свойствам, опубликованных в журналах, непригодны, поскольку нет свидетельства того, что исследователь точно измерил то, что он намерен был измерить, а также что возможный источник ошибок был исключен или учтен при измерениях».

Расчет не всегда обеспечивает требуемую точность, но часто является единственным способом пополнения данных. В настоящее время имеется большое число методов для определения отдельных свойств веществ, однако выбор соответствующего метода сопряжен с рядом трудностей, поскольку большинству из них свойственны следующие недостатки: а) низкая точность; б) ориентация на традиционный расчет и использование номограмм, таблиц и графиков для определения свойств веществ. Номограммы и таблицы не только снижают точность методов, но и затрудняют машинную реализацию; в) узость области применения по классу веществ и диапазону изменения параметров. Это приводит к тому, что одно и то же свойство нужно рассчитывать по различным формулам в зависимости от вещества и интервала изменения параметров. Такие методы не только сложны в применении, но и не обеспечивают непрерывности зависимости свойств от параметров; г) невозможность экстраполяции функциональной зависимости за область определения параметров; д) термодинамическая несовместимость методов.

Помимо точности, обеспечение непрерывности и дифференцируемости зависимости, представляющей свойство, а также возможность экстраполяции (даже в гипотетические состояния) являются основными требованиями, предъявляемыми к машинным методам расчета. Эти требования позволяют исключить опасность «зацикливания» в точках разрыва функций (точках перехода к другим расчетным формулам) и прерывания итерационных расчетов при выходе значений за диапазон определения функции. В этом смысле (при необходимости экстраполяции) наилучшей зависимостью является линейная зависимость.

Поэтому определение физико-химических, теплофизических и других свойств веществ должно проводиться на единой методологической основе, включая экспериментальные и расчетные методы с учетом области применения данных. Следует иметь в виду, что для реализации технологических процессов будущего потребуются вещества, свойства которых в литературных источниках практически отсутствуют. Это относится к альтернативным сырьевым источникам, синтетическим топливам, продуктам био-

технологии и т. д., представляющим собой сложные гомогенные и гетерогенные системы. В методологическом аспекте определение свойств веществ и соединений должно базироваться на интеграции лабораторных измерений свойств тщательно отобраных систем, критической оценки получаемых данных и теоретических исследований для получения расчетных методов, обладающих прогнозирующими характеристиками. Хотя прогнозирующие алгоритмы, оформленные в виде комплексов программ, становятся все более предпочтительным методом получения данных о свойствах, интенсивное развитие получают экспериментальные методы, особенно в рамках АСНИ. По существу, АСНИ должна выполнять функции сбора, накопления и обработки экспериментальных данных для САПР. Тем более, что большинство зависимостей для определения свойств можно применять лишь при наличии определенного набора экспериментальных данных. Это, например, фазовое равновесие, транспортные свойства неьютоновских жидкостей при высоких температурах, полидисперсные системы, межфазный перенос и т. д.

Организационно получение и накопление данных целесообразно оформить в виде группы или лаборатории, в функции которой входит следующее: литературный поиск данных, разработка расчетных методов получения данных, разработка экспериментальных методов получения данных, оценка данных [2].

Применительно к проблеме проектирования конкретного процесса необходимо установить: а) какие данные по рассматриваемой проблеме имеются в литературе; б) какие данные необходимо оценить или рассчитать; в) являются ли эти данные достоверными; г) какие экспериментальные данные необходимо определить дополнительно. Очевидно, решение всех задач, связанных с получением необходимой совокупности данных по рассматриваемой проблеме, следует проводить в совокупности в рамках одного подразделения или АСНИ.

Литературный поиск данных. Он основан прежде всего на знании библиографии и источников данных по рассматриваемой проблеме. При этом основным источником данных является первичная научная литература, поиск и обработку которой может качественно осуществить высококвалифицированный специалист. Может оказаться, что литературный поиск требуемых данных займет больше времени и усилий, чем непосредственное экспериментальное определение свойств, особенно если это связано с поиском специфических свойств в узкой области, например плотности или теплоемкости отдельного вещества при определенной температуре. Более обоснован поиск многих свойств вещества или одного свойства многих веществ. Результаты такого поиска составляют базу данных, на основе чего можно сделать вывод о необходимости расчета или измерения недостающих данных.

Литературный поиск существенно облегчается благодаря наличию вторичных источников данных в виде справочников, справочных систем, библиографических ссылок на другие источники. Это могут быть табличные данные всех свойств, табличные данные вместе с параметрами широко известных уравнений, таблицы выборочных значений, критически отобранные и обработанные компиляции. Важно, чтобы пользователь правильно сориентировался в этом многообразии вторичных источников и не сделал ошибки относительно их достоверности. Может оказаться, что данные во вторичном источнике являются лишь копией первичного, в то время как пользователь будет к ним относиться как к критически отобранным и проверенным.

Разработка расчетных методов получения данных. Она приобретает все большее значение по мере развития фундаментальных исследований в области теории растворов и молекулярной термодинамики. Более широко расчетные методы применяются в дополнение к экспериментальным данным. Даже хорошие экспериментальные данные часто нуждаются в аналитической форме представления для их интерполирования или экстраполирования или в качестве исходных данных различного рода систем. В других случаях потребность в расчетных методах появляется при расчете одних свойств по известным термодинамическим соотношениям для других, например энтальпии через теплоемкость, теплоты испарения через давление пара и т. д. Наряду с точными расчетными методиками часто возникает необходимость в оперативной оценке свойств, экспериментальное измерение которых достаточно трудоемко. В этом случае могут быть использованы на первом этапе оценочные корреляции, прежде чем эти данные будут получены экспериментально.

Расчет обычно основан на корреляции известных данных по чисто эмпирическим, полумпирическим (имеющим в своей основе какую-либо теоретическую концепцию) и теоретическим зависимостям. Теоретические зависимости не представляются в настоящее время достаточно разработанными, чтобы можно было их использовать без экспериментальных данных. Поэтому расчеты выполняются в основном по полумпирическим зависимостям, в которых используются некоторые теоретические концепции (например, методы функциональных групп, соответственных состояний, гомологических рядов и т. д.). Хотя эти зависимости и приближенные, в определенном смысле они обладают прогнозирующей способностью.

Различают несколько способов получения аналитических зависимостей, на основе которых разрабатываются расчетные методы.

1. Значение параметра для условий процесса неизвестно, но имеются закон его изменения и экспериментальные значения этого параметра для других условий. Решение в этом случае получается путем подстановки известных значений в данную

зависимость для определения постоянных закона изменения. Этот способ представляется наиболее надежным, так как в его основе используется некоторая теоретическая модель, параметры которой можно определить по минимальному количеству экспериментальных данных, и получил наибольшее распространение. Такой подход широко используется при описании неидеальности жидкой фазы, когда для расчета равновесия многокомпонентных смесей предварительно необходимо определить параметры модели по бинарным равновесным данным.

2. Известно несколько значений параметра, но для условий, отличающихся от условий проведения процесса. Закон изменения параметра отсутствует, но известна зависимость этого параметра для аналогичного вещества (например, вещества из гомологического ряда). В этом случае значение параметра находится путем интерполирования или экстраполирования с учетом аналогии изменения его для другого вещества, выбранного в качестве стандартного. Такой способ находит узкое применение и лишь для определения свойств членов гомологических рядов.

3. Экспериментальное значение параметра отсутствует. В этом случае трудно получить его точное значение. Для нахождения приближенного значения используется либо аддитивность свойств составляющих веществ атомов, связей или групп атомов, либо способ аналогии свойств различных веществ. Этот метод хотя и обладает в некоторых случаях высокой точностью, нежелателен для машинной реализации в силу того, что связан с таблицами и набором поправочных коэффициентов для отдельных групп веществ и поэтому громоздкий.

4. Известно несколько экспериментальных значений параметра, перекрывающих область изменения условий протекания процесса, но неизвестен закон его изменения. В этом случае закон изменения параметра в области протекания процесса устанавливается путем обработки экспериментальных данных по эмпирическим зависимостям статистическими методами. Такой подход широко применяется в практике расчетов, особенно в тех случаях, когда отсутствует теоретический подход к рассматриваемому явлению и последнее рассматривается как «черный ящик». Проблема заключается в том, чтобы подобрать класс функций, наилучшим образом воспроизводящих экспериментальные данные. Этот способ получил распространение при описании зависимости свойств от параметров процесса, например зависимости вязкости от температуры и т. д.

Для расчета свойств веществ по первому способу, как правило, имеются формулы, содержащие константы, которые получены в результате обработки и обобщения результатов вычислений для большого числа типов веществ. Эти формулы обычно сопровождаются оценками точности, достоверность которых не всегда подтверждается. Поэтому в конкретных приложениях

они должны подвергаться дополнительной проверке. Основная причина этого обстоятельства заключается в ограниченной области применения формул по классам веществ. Такая проверка формул должна проводиться по представителю эксперименту для различных классов веществ.

Разработка экспериментальных методов получения данных. Она требуется в тех случаях, когда необходимо определить свойства в условиях, отличных от ранее используемых, или при ограничениях типа по коррозионной стойкости и токсичности. Проведение экспериментальных исследований связано обычно с большими затратами труда и времени. Поэтому естественно стремление экспериментаторов иметь инструментальную технику, обладающую высокой точностью, быстродействием и широкой областью применения по температуре, давлению, составу. Однако разработка такой аппаратуры — весьма сложная и практически нереальная задача. Поэтому повышение точности и быстродействия эксперимента возможно унификацией математического обеспечения и автоматизацией последнего на базе АСНИ.

Развитие АСНИ в значительной степени обязано совершенствованию инструментальной и вычислительной техники, разработке эффективных средств преобразования информации, проникновению микропроцессорной техники в аналитическое приборостроение. Так, применение ЭВМ в аналитическом приборостроении позволило разработать новую технику, обладающую рядом принципиальных преимуществ: существенно повысилась точность и разрешающая способность приборов благодаря применению современных методов идентификации; увеличился на несколько порядков динамический диапазон регистрации входного сигнала; существенно увеличилось отношение сигнала-шума за счет суммирования и усреднения спектров (для ЯМР-спектрометра); полученная с одного образца; значительно увеличилась производительность прибора; уменьшилась вероятность появления субъективных и непредсказуемых ошибок при обработке и интерпретации данных; появилась возможность накопления и хранения экспериментальных данных, их последующей расшифровки и интерпретации.

Практические примеры АСНИ со всей очевидностью свидетельствуют о необходимости развития как технических средств, так и программного обеспечения. В смысле технических средств может оказаться полезным опыт, накопленный в области разработки АСУТП в реальном масштабе времени. Однако специфика АСНИ состоит в том, что требуемые устройства (датчики, усилители, преобразователи, регуляторы, исполнительные механизмы) должны обладать высокой точностью, быстродействием и надежностью. АСНИ ориентирована на получение исходной информации для многих последующих приложений (свойств веществ.

составов, кинетических и гидродинамических параметров и т. д.), и требования к точности информации должны быть выше требований вторичного использования. Что касается программного обеспечения, то накопленный опыт в области моделирования во многих случаях оказывается вполне удовлетворительным, но не всегда реализуемым из-за трудностей получения соответствующих экспериментальных данных.

Создание систем, объединяющих и обеспечивающих проведение экспериментов на приборах различного типа, позволяет существенно повысить достоверность получаемых результатов, поскольку имеется возможность проводить сравнительный анализ данных, полученных различными способами, использовать комбинированные методы оценки.

Оценка получаемых данных. Она заключается в их критическом анализе и выборе наилучших по точности и достоверности. Это относится ко всем данным, т. е. полученным различными способами. Часто бывают ситуации дублирования данных из различных источников, и здесь задача установления их достоверности становится очевидной в силу их различия. Однако и данные в единственном экземпляре должны подвергаться проверке, в конечном итоге за их точность несет ответственность либо источник, либо пользователь. Обычно проверка данных проводится на основе некоторых закономерностей типа уравнения состояния (для данных $P-Y-T$), уравнения Гиббса—Дюгема (для равновесных данных) и т. д. и состоит в установлении факта их совместимости. Для экспериментальных данных основанием их достоверности могут служить чистота образцов, точность калибровки экспериментальной установки, соответствие метода измерения по сравнению с другими методами, соответствие данных с другими источниками или полученными другими методами, репутация исследователя, выполняющего эксперимент.

Правильный выбор критерия оценки достоверности данных является важным этапом в организации экспериментальных исследований и последующей обработке результатов. Помимо очевидных признаков реалистичности данных (например, монотонности зависимости давления пара от температуры, изменения плотности от давления, концентрации компонента от 0 до 1 в мольном измерении и т. д.) используются признаки, основанные на аналогии изменения свойств. Например, разность между теплопроводностями насыщенных жидкости и пара при данной температуре изменяется линейно с энтальпией парообразования при той же температуре [3].

Помимо сбора и обработки данных, важным этапом создания информационной базы САПР является накопление и хранение данных в требуемой форме. Рассмотренный комплекс действий по получению и обработке данных, а также проведение экспериментальных исследований непосредственно на лабораторной

или пилотной установке с целью уточнения параметров моделей или отдельных свойств составляет круг действий АСНИ. Это означает, что АСНИ целесообразно рассматривать как одну из подсистем при решении более общей задачи, например проектирования. В этом случае получаемые данные должны передаваться в соответствующую базу данных САПР. Такое взаимодействие АСНИ и САПР позволяет оперативно на модельной установке (лабораторной или пилотной) обрабатывать различные проектные решения.

Более широкие возможности имеют специализированные подразделения по сбору и обработке данных, такие, как Центр по химической технологии при Национальном бюро стандартов США [4]. Центр имеет три отдела: научный, термодинамический и метрологический. В конечном итоге его функции состоят в разработке экспериментальных и теоретических методов определения свойств газообразных, жидких и твердых веществ для решения самых различных задач химической технологии. Здесь собираются данные и на основании тенденций развития химической технологии ставятся задачи под экспериментальным исследованием.

Ранее отмечалось, что набор свойств вещества определяется конкретной областью приложения САПР. Естественно, что для систем узкого приложения этот список будет небольшой размерности, для систем общего назначения (типа информационно-справочных) он весьма обширен и постоянно растет. В табл. 5.1 приведены основные теплофизические свойства, используемые при решении задач оптимизации и проектирования информационно-решающей системы Центра данных Минвуза СССР [5].

Базовая система уравнений для расчета термодинамических свойств состоит из уравнения состояния и трех температурных аппроксимаций, определяющих свойства в идеальном газовом состоянии и значения давлений на линиях затвердевания и насыщения. Эти уравнения имеют вид

$$z = 1 + \sum_{i=1}^r \sum_{j=0}^q b_{ij} \omega^i \tau^{-j}; \quad (5.1)$$

$$c_p^0/R = \sum_{j=0}^m d_j \Theta^j + \sum_{j=m}^n \beta_j \Theta^{-j}; \quad (5.2)$$

$$\pi \lambda = \sum_{j=0}^m a_{\lambda j} \tau^j; \quad (5.3)$$

$$\pi_s = \sum_{j=0}^m a_{sj} \tau^j; \quad (5.4)$$

где $z = P/(\rho RT)$; $\omega = \rho/\rho_{кр}$; $\tau = T/T_{кр}$; $\Theta = T/100$; $\pi \lambda = P_{\lambda}/P_{кр}$; $\pi_s = P_s/P_{кр}$; z , P , ρ , T , R , c_p^0 — сжимаемость, давле-

Таблица 5.1

Свойство	Обозначение	Свойство	Обозначение
Давление	P	Энтальпия	H
Температура	T	Энтропия	S
Удельный объем	v	Внутренняя энергия	U
Вязкость	ρ	Функция Гиббса	Φ
Коэффициент сжимаемости	z	Функция Гельмгольца	F
Изобарная теплоемкость	c_p	Отношение теплоемкостей	κ
Изобарная теплоемкость	c_p	Теплота парообразования	r
Скорость звука	w	Теплоемкость вдоль линии фазового перехода	c_{λ}, c_{μ}
Коэффициент Джоуля — Томпсона	μ	Степень сухости	x
Показатель адиабаты	k	Коэффициент теплопроводности	λ
Летучесть	f	Коэффициент динамической вязкости	η
Коэффициент объемного расширения	α	Коэффициент кинематической вязкости	ν
Изотермический коэффициент сжатия	ρ	Коэффициент самодиффузии	D
Термический коэффициент давления	γ	Коэффициент Прандтля	Pr
Термическое давление	P_t	Коэффициент температуропроводности	a
Адиабатическая сжимаемость	β_a	Другие термодинамические функции	ψ
Изотермическая сжимаемость	β_t		

ние, плотность, температура, универсальная газовая постоянная, изобарная теплоемкость газа в идеальном состоянии соответственно; $P_{кр}$, $\rho_{кр}$, $T_{кр}$ — критические параметры; индексы λ и μ определяют линию затвердевания и насыщения; b_{ij} , d_j , b_j , μ_{ij} , a_{ij} — эмпирические константы аппроксимаций, вычисляемые по экспериментальным или табличным данным для каждого вещества.

Система уравнений (5.1)—(5.4) обеспечивает расчет свойств веществ в жидком и газообразном состояниях, в двухфазной области и на линиях равновесия фаз. Требуемый диапазон параметров для большинства веществ обычно определяется областью температур от тройной точки до 1000—1500 К и диапазоном давлений от 100 до 300 МПа.

В табл. 5.2 приведены расчетные формулы для определения свойств чистых веществ, определенных как базовые при расчете и проектировании массообменных процессов [6, 7]. Все свойства подразделяются на две группы.

Свойства-константы: число атомов в молекуле N ; молекулярная масса M ; нормальная температура кипения

Таблица 5.2

Характеристика	Расчетная формула
$T_{кр}$, К	$T_{кр} = T_{кип} \cdot 1,59 \sqrt{M}$
$P_{кр}$, Па	$P_{кр} = 4,053 \cdot 10^6 T_{кип} / \sqrt{MN}$
$V_{кр}$, м ³ /моль	$V_{кр} = 8,315 T_{кр} / P_{кр} (3,72 + 0,26 (\alpha_c - 7))$
$z_{кр}$	$z_{кр} = 1 / (3,72 + 0,26 (\alpha_c - 7))$
$H_{исп.к}$, Дж/моль	$H_{исп.к} = 88 T_{кип}$
α_c	$\alpha_c = 0,9076 (1 + H_{исп.к} (8,32 T_{кр}))$
$T_{пл}$, К	$T_{пл} = T_{кр} - T_{кип}$
P_V , Па	$P_V = P_{кр} 10^{-(\Phi(\tau) - (\alpha_c - 7) \Psi(\tau))}; \Phi(\tau) = 0,118 \varphi(\tau) - 7 \lg \tau; \Psi(\tau) = 0,0364 \varphi(\tau) - \lg \tau; \varphi(\tau) = 36 \tau + 42 \lg \tau - 35 - \tau^6; \tau = T/T_{кр}$
$H_{исп}$, Дж/моль	$H_{исп} = H_{исп.к} [(1 - \tau) / (1 - \tau_{кип})]^{0,34}$
ρ_L , кг/м ³	$\rho_L = \rho_V + 1050 (1 - \tau)^{0,3}$
ρ_V , кг/м ³	$\rho_V = (M (82,06 T_{кип})) 10^{(5\tau - 2)}$
c_L , Дж/(моль · К)	$c_L = 0,0065 M / (0,1745 - 0,0835 \tau)^{2,5}$
c_V , Дж/(моль · К)	$c_V = 7,45 M^{0,54} + 0,335 M (T - 373)$
μ_L , Па · с	$\mu_L = 0,399 \cdot 10^{-6} (\rho_L / M) \exp((H_{исп} / 8,32 - T_{кип}) \cdot 0,408 T)$
μ_V , Па · с	$\mu_V = 6,2 \cdot 10^{-6} \tau^{0,94} M^{0,5} P^{2,3} T_{кр}^{-1/6}$
λ_L , Вт/(м · К)	$\lambda_L = 4,3 \cdot 10^{-3} c_L (\rho_L / M)^{4/3}$
σ , Н/м	$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-6} T (3,9 + \lg(T \rho_L \rho_V M)) / (M / \rho_L)^{2/3}$
α , К ⁻¹	$\alpha = 0,04314 / (T_{кр} - T)^{0,44}$
P_{ch} , Дж ^{1/2} /м ^{3/2}	$P_{ch} = 1,78 \cdot 10^{(-11,2 \ln(103,4 T_{кип} (\rho_L - 0,5937)))}$

$T_{кип}$; критическая температура $T_{кр}$; критическое давление $P_{кр}$; критический мольный объем $V_{кр}$; критический коэффициент сжимаемости $z_{кр}$; энтальпия испарения при температуре кипения $H_{исп.к}$; коэффициент Риделя α_c ; температура плавления $T_{пл}$; минимальная энергия межмолекулярного взаимодействия E_m .

Свойства — зависимости от температуры: давление пара P_V ; энтальпия испарения $H_{исп}$; плотность жидкости ρ_L ; плотность пара ρ_V ; теплоемкость жидкости c_L ; теплоемкость пара c_V ; вязкость жидкости μ_L ; вязкость пара μ_V ; теплопроводность жидкости λ ; поверхностное натяжение σ ; коэффициент термического расширения жидкости α ; парахор P_{ch} .

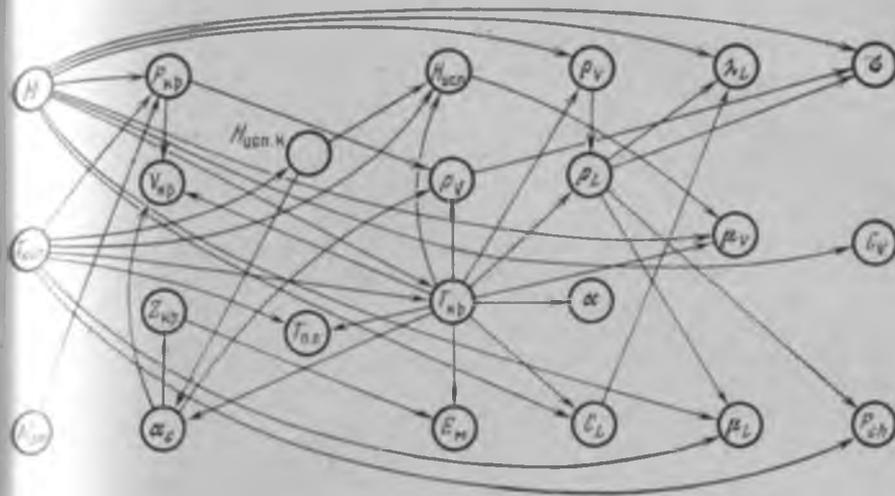


Рис. 5.1. Последовательность расчета свойств

Для аппроксимации температурной зависимости свойства использованы ортогональные полиномы. Помимо обеспечения требуемой точности, формулы подбирались таким образом, чтобы иметь возможность расчета недостающих свойств по минимальному числу известных. При отсутствии экспериментальных данных по свойствам для некоторого вещества последние могут быть рассчитаны лишь при наличии $N, M, T_{кип}$. Информационный граф, отображающий последовательность расчета всех свойств, приведен на рис. 5.1. Точность воспроизведения свойств в этом случае характеризуется погрешностью, полученной при проверке этой формулы по экспериментальным данным.

5.2. Организационная структура информационного обеспечения

Отдельные задачи проектирования химико-технологических производств тесно связаны друг с другом и образуют единый комплекс. Однако до последнего времени эта особенность в силу целого ряда объективных причин редко находила отражение в разрабатываемых САПР ХТС. Эти системы строились в виде набора достаточно обособленных прикладных программ, каждая из которых решала определенные задачи проектирования. Во многих системах информационное обеспечение проводилось традиционным способом, т. е. необходимая информация отыскивалась в литературе, наносилась в требуемой форме на машинные носители (перфокарты) и использовалась в лучшем случае несколько раз для решения одной задачи. В других системах часто используемые исходные данные объединялись в файлы, ис-

пользуемые соответствующими программами, что давало возможность многократно использовать информацию и накапливать ее. Файл логически представляет собой поименованную совокупность описаний однородных предметов, каждой записи соответствует один предмет. Отдельные элементы записи, представляющие определенную характеристику предмета, называются полями или элементами данных.

При разработке новой программы, как правило, требуется новый файл. Состав полей записи этого файла может почти полностью совпадать с составом полей какого-либо из уже имеющихся файлов и отличаться от него только одним или несколькими элементами данных или формой их представления. Расширение существующего файла введением в каждую запись нового поля или изменением его характеристик является сложной и трудоемкой работой для программиста. Такая работа включает, с одной стороны, внесение изменений и дополнений в существующий файл, а с другой — изменение всех тех программ, которые ранее работали с этими данными. При этом программист должен детально знать организацию файла с точки зрения его логической структуры и размещения на внешних носителях информации. Для переделки имеющихся программ также требуется детальное знание их внутренней реализации.

При укрупнении файла введением новых элементов данных время и сложность поиска данных увеличивается, соответственно увеличивается и объем той части программы, которая предназначена для поиска данных. Особенно существенно увеличение в случае, когда в одном и том же файле необходимо вести поиск по различным элементам данных (ключам).

Для решения различных прикладных задач и, следовательно, для разных программ могут требоваться разные связи между элементами данных в рамках одной записи или между записями в файле. Попытка объединения таких файлов в один общий файл может повлечь, с одной стороны, существенное дублирование данных, а с другой — неоправданные затраты на переделку программного обеспечения. В принципе при проектировании прикладного программного обеспечения существует возможность организации программ и файлов таким образом, чтобы различные программы использовали одни и те же файлы. Однако в этом случае расширение системы вызывает еще более сложные проблемы модификации уже имеющегося задела программ и файлов, поскольку, кроме изменения программ, необходимо учесть и изменения связей между ними. Более того, в процессе работы нескольких программ с одним и тем же файлом каждая отдельная программа не использует, как правило, всех полей данных; при этом существует возможность неправильного изменения неиспользуемых элементов данных при работе программ, либо неполной корректировки записи.

Все эти обстоятельства явились причиной построения обособленных программных комплексов по принципу программа—файл для ее работы. Эксплуатация подобных систем выявила ряд недостатков, наиболее существенным из которых является дублирование данных. Поскольку различные программы, решающие родственные задачи, часто требуют одинаковых элементов данных, эти элементы должны неизбежно дублироваться в соответствующих файлах. В крупных программных системах обработки данных дублирование может существенно повысить требования к объемам оперативной и внешней памяти вычислительной установки.

Другой негативной стороной дублирования данных является дублирование работ по созданию и ведению информационных файлов, которое может достигать катастрофических размеров.

Кроме этого, САПР характеризуются внутренней связью решаемых задач, которая должна проявляться и в программах. Подобная связь осуществляется путем использования результатов работы одних программ в качестве исходных данных для других. Поскольку число таких связей между задачами в САПР достаточно велико, программный комплекс, построенный по принципу программа—файл, представляет собой сложную систему, требующую постоянного вмешательства обслуживающего персонала для упорядочения обмена данными между программами. Такая организация системы является трудоемкой в эксплуатации и крайне ненадежной.

При функционировании программной системы обработки данных одним из важнейших моментов является точная и своевременная корректировка (обновление) информации в файлах, особенно в тех системах, которые эксплуатируются коллективно в режиме разделения времени. Этот момент обуславливает оперативность получения информации и ее достоверность и в конечном итоге определяет работоспособность всей системы. При дублировании элементов данных в различных файлах необходимо обращать особое внимание на операции обновления данных, поскольку корректировка должна быть проведена во всех файлах, где присутствует данное поле. При обновлении дублированных данных создаются предпосылки для появления ошибок и несоответствий в файлах системы и, кроме того, утрачивается оперативность внесения изменений.

Решение всего комплекса рассмотренных вопросов концентрируется в идее создания специальных программных средств, автоматизирующих работу с данными. С помощью этих средств должна осуществляться связь между прикладными программами и данными, имеющимися в системе. Комплекс информационных файлов и программ, предназначенных непосредственно для организации централизованного неизбыточного хранения и поиска информации, а также для связи с прикладными программами,

выполняющими ее обработку (как отмечалось в гл. 4), называется банком данных.

Разработка БД ведется в основном по двум направлениям. Это банки в системах «искусственного интеллекта» как модели по переработке информации и банки как самостоятельные программные комплексы в АСУ, САПР и т. д. Первое направление связано с общей проблемой «искусственного интеллекта», и его разработки в значительной степени носят теоретический характер в области представления знаний — выработке концепций о том, как описывать реальный мир [8]. Прикладное значение этих работ весьма широкое, начиная от автоматизации проектирования и до «интеллектуальных» систем, способных воспринимать информацию на естественном языке, анализировать ее, делать прогнозирующие выводы. Применительно к проблеме автоматизации программирования задача заключается в поиске способов уменьшения сложности решения задачи на ЭВМ за счет возложения отдельных частей технологического цикла разработки модели на программное обеспечение [9]. Второе направление по разработке БД обычно преследует цель создания специализированных банков по отдельным отраслям промышленности. Основное внимание при этом делается на разработку прикладных программ при упрощенной логической структуре.

В системе, основанной на БД, прикладные программы обращаются за данными для обработки не к внешним носителям информации, а к программам банка — СУБД, которые организуют поиск, ввод и представление информации соответствующим программам из специально организованных файлов — баз данных (см. гл. 4). При таком способе организации работы с данными обычно говорят о логической форме представления данных для прикладных программ. Альтернативой такому принципу обмена является организация непосредственного обращения программ, обрабатывающих данные, к внешним устройствам. В последнем случае говорят о физической форме представления данных, поскольку при таком обращении необходимо учитывать тип запоминающего устройства, хранящего информацию, принципы организации файлов и т. д. Вообще понятия логической и физической форм представления данных не являются абсолютными. Многие операционные системы содержат набор средств, обеспечивающих некоторую логическую форму представления данных для прикладных программ, однако эти средства не освобождают программиста от таких функций, как организация данных, их поиск, выделение необходимых элементов данных из записи и др.

Программное обеспечение БД дает возможность существенно расширить функции операционных систем в плане реализации логической формы представления данных, а именно добиться независимости программ от данных. Собственно говоря, независимость программ от данных и является главной целью, которую

преследует использование СУБД для информационного обеспечения. Независимость от данных — это такое свойство прикладных программ, которое обеспечивается системой управления базами данных и заключается в независимости прикладных программ от характеристик, хранимых в системе данных (но, естественно, не от их содержания). Независимость может быть физическая и логическая. Физическая независимость от данных выражается в том, что прикладные программы освобождаются от необходимости помнить, где именно и в каком физическом виде хранятся те или иные данные. Логическая независимость представляет собой более высокий уровень независимости от данных. Суть ее заключается в том, что прикладные программы освобождаются от необходимости помнить жестко заданные логические характеристики данных (например, порядок следования полей в записи файла, способ доступа к записям, связи между различными файлами и т. п.). Как уже отмечалось, логическая независимость операционными системами не поддерживается.

Принцип независимости прикладных программ от данных является важным потому, что позволяет разным программам по-разному «видеть» одни и те же данные и тем самым упростить пользование базой для различных групп пользователей. Кроме того, этот принцип дает возможность реализовать различные формы физического хранения данных при одном и том же логическом представлении для прикладных программ, что позволяет, во-первых, безболезненно реорганизовывать структуру хранимых данных (например, добавить новое поле данных), а во-вторых, легко подстраивать физическую организацию данных под текущие потребности, такие, например, как необходимость сэкономить оперативную или внешнюю память ЭВМ, либо стремление уменьшить время доступа к информации и т. д. Реструктуризация данных очень важна с точки зрения поддержания эффективности использования БД в процессе развития программной системы, поскольку именно она позволяет поддерживать в системе динамическую информационную модель, адекватно отражающую предметную область.

Таким образом, использование СУБД коренным образом меняет для программиста его представление о виртуальной (воображаемой) ЭВМ: в этом случае программист общается с ЭВМ не через программы операционной системы, а через программы СУБД (рис. 5.2). Кроме того, СУБД должна выполнять также ряд других функций, таких, как обеспечение секретности, защиту целостности данных, синхронизацию доступа к базам данных, защиту от отказов системы, восстановление баз данных после сбоев и т. д.

К БД предъявляется ряд требований, среди которых основными являются надежность, достоверность и долговременность хранения информации, удобство и простота эксплуатации и эф-

фективность. Если первые из перечисленных требований являются очевидными, то что касается эффективности, то в настоящее время отсутствуют какие-либо обобщенные методики ее оценки, базирующиеся на количественных характеристиках. Эффективность оценивается качественно по целому ряду весьма специфических критериев. В целом же она зависит от величины капитальных и текущих затрат, а также от экономии, образующейся в результате использования БД.

В качестве других критериев эффективности БД используются параметры, характеризующие непосредственно технические, структурные и потребительские показатели. Это физическая надежность информации в смысле ее достоверности; быстрейшее действие в получении необходимой информации; частота использования хранимых данных; возможность использования одной и той же информации для решения различных задач [10].



Рис. 5.2. Структура виртуальной ЭВМ при использовании БД

В большей степени эффективность информации зависит от дублирования информации. Дублирование в ряде случаев увеличивает быстрейшее действие, однако при этом затрудняется поддержание адекватности информационной модели реальному объекту. Поэтому принято считать дублирование фактором, отрицательно влияющим на эффективность. Фактором, повышающим эффективность банка, является способность последнего работать как в режиме непосредственной связи с системой, так и в терминальном (диалоговом) режиме. И, наконец, эффективность определяется независимостью прикладных программ от хранимых данных.

База данных. Обычно базу данных определяют как неизбыточную совокупность логически связанных данных, которые могут быть использованы более чем для одного приложения. Из этого определения явствует, что главным признаком, по которому данные объединяются в базы данных, является их логическая взаимосвязь. В самом деле, понятие «информация» имеет три аспекта: реальный мир, в котором существуют объекты с вполне определенными свойствами; идеи и мысли об этих объектах в представлении людей и программистов; и, наконец, условные записи, которыми кодируются эти представления в памяти ЭВМ. Объединение данных в базу данных должно отражать восприятие людьми реальных объектов окружающего мира, при

этом в базе данных должны находиться такие данные, которые содержательно описывают интересующие нас объекты, т. е. база данных должна являться адекватной информационной моделью предметной области. Очевидно, что по своему смыслу данные в базе данных логически связаны друг с другом. Эти связи могут быть различной природы, например: принадлежность атрибутов одному объекту, выражение какого-либо отношения между отдельными объектами и т. д. Вообще говоря, если бы назначением базы было только хранение данных, то ее структура была бы чрезвычайно простой. Причина сложности баз данных заключается именно в том, что они должны еще обеспечивать и связи между различными элементами данных. Следовательно, чтобы уметь строить и использовать базы данных, необходимо уметь



Рис. 5.3. Отдельный элемент данных и связь между элементами

устанавливать логические взаимосвязи между элементами данных.

Элемент данных (поле) является атомом данных, это минимальная неделимая единица информации (в контексте представления людей о реальных объектах). Сам по себе элемент данных ничего не представляет, он приобретает смысл только тогда, когда связан с другими элементами данных (рис. 5.3).

Поскольку в базе данных хранится много элементов данных, то, чтобы отразить все связи между ними, необходимо нарисовать некоторую структуру, или схему данных. Поскольку схема данных фактически представляет собой граф, то можно воспользоваться любым способом описания графов, именно это и находит отражение в существовании множества формальных языков описания схем баз данных.

На рис. 5.4 изображен пример схемы данных для базы данных по отраслям промышленного производства. Как видно из рисунка, схема данных представляет собой структуру, которая описывает имена объектов и их атрибуты, а также определяет существующие между ними связи. Сама схема не содержит данных, она представляет собой как бы шаблон, в который могут быть помещены реальные элементы данных, в этом случае говоря об экземпляре схемы и представляет собой базу данных.

Связи, соединяющие элементы данных друг с другом, формально могут быть четырех видов, что изображается стрелками на соединяющих элементы данных линиях. Одна стрелка означает, что в каждый момент времени каждому значению одного (исход-

ного) элемента данных соответствует одно и только одно значение другого (ассоциированного) элемента. Так, например, элементы данных «Фамилия студента» и «Возраст» находятся в такой однозначной связи. Двойная стрелка означает, что одному значению исходного элемента соответствует ноль или больше значений ассоциированного с ним элемента. Такая множественная связь существует, например, между отраслью и заводом: в отрасль может входить несколько заводов. Возможность существования как прямых, так и обратных связей как раз и дает че-



Рис. 5.4. Схема данных (аведачка означает ключевое поле)

тыре типа связей между двумя элементами данных: «один к одному», «один ко многим», «многие к одному» и «многие ко многим».

Необходимо отметить, что схема, изображенная на рис. 5.4, является недостаточно точной, хотя часто схемы изображаются именно таким образом. Во-первых, имя некоторой части схемы представлено как блок, идентичный блоку, содержащему имя элемента данных. Так, например, «Производство» и «Адрес» расположены рядом в соседних блоках, хотя «Адрес» является элементом данных, а «Производство» — нет, это имя группы элементов данных, содержащей «Наименование», «Себестоимость» и «Выпуск». Во-вторых, из этой схемы не ясно, какие группы элементов данных представляют собой типы записей, а какие — типы агрегатов данных. Различие между записью и агрегатом заключается в том, что число экземпляров типа записи может быть произвольным, а число типа агрегата — ограниченным. Агрегат обычно является составной частью некоторой записи и не является самостоятельным. Недостатком схемы является также и то, что некоторые блоки имеют одинаковые имена.

В [10] даются следующие правила изображения схем: 1) объединение элементов данных группы должно быть продуманным; 2) если в записях присутствуют агрегаты данных, они должны быть четко выделены; 3) на рисунке должно быть отражено различие между именами элементов данных, агрегатов данных и именами записей; 4) повторение имен не допускается; 5) должны быть четко определены первичные ключи записи, т. е. те элемент-

ты данных, значение которых однозначно идентифицирует запись (на схеме они выделены); б) в тех случаях, когда вторичные ключи (элементы данных, значения которых используются дополнительно для идентификации записи) являются важной частью схемы, они должны быть четко определены; 7) на рисунке должны быть четко представлены типы связей между элементами; 8) если связям между записями представляется имена, они должны присутствовать на рисунке.

Исправленная в соответствии с этими правилами схема приведена на рис. 5.5. Отметим, что направленность стрелок на линиях, связывающих записи, обладает конкретным смыслом: она определяет возможные запросы к базе данных. Так, например, если бы на схеме отсутствовала обратная стрелка по связи «отрасль—завод», то нельзя было бы получить ответа на такой вопрос: «Какой отрасли принадлежит завод с таким-то названием

завода?». Иногда между двумя типами данных может существовать более одной связи. Например, связь «завод—продукция» может иметь смысл «завод производит продукцию», или «завод будет производить продукцию», или «завод потребляет продукцию другого завода». Если все эти связи представляют интерес, то они должны быть отображены на схеме (рис. 5.6).

Имеется несколько типов структур данных, используемых для построения баз данных. Наиболее простой структурой является двумерный (плоский) файл. Так, например, отдельно взятый файл «Продукция» является двумерным. Каждая запись имеет одинаковый набор полей, и поэтому файл может быть представлен в виде двумерной матрицы (рис. 5.7).

К сожалению, многие применяемые логические структуры не являются плоскими, соответственно этому существует три под-

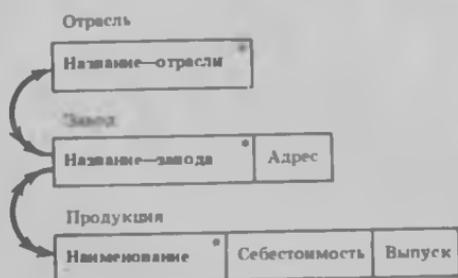


Рис. 5.5. Исправленная схема данных

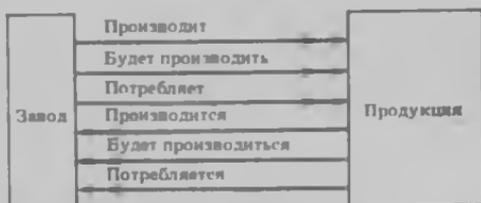


Рис. 5.6. Множественные отношения

Этилбензол	4,6	2000
Фенол	2,38	15000
Метилметакрилат	15,3	5500
Полиэтилен высокого давления	0,78	3000000
Сода каустическая	0,03	400000
Дихлорэтан	0,16	175000

Рис. 5.7. Представление файла «Продукция» в виде двумерной таблицы

хода к представлению данных: иерархический, сетевой и реляционный.

Иерархическая модель данных (файл) организует данные в виде иерархической древовидной структуры, состоящей из соподчиненных узлов и ветвей. Иерархия начинается с корневого узла, соединенного с порожденными (зависимыми) узлами, причем каждый узел более высокого уровня связан только с одним узлом более низкого уровня. Иерархическую структуру можно получить, если убрать из схемы рис. 5.4 файл «Продукция». Узел, находящийся на предшествующем уровне, является исходным, и доступ к каждому узлу за исключением корневого, осуществляется через него.

Некоторые СУБД предназначены только для обработки баз данных с иерархической структурой. Их достоинством является простота реализации и наглядность представления. Однако множество данных по своей природе не связаны в древовидные структуры. Трудность использования иерархических моделей данных состоит в том, что в них непосредственно не поддерживаются взаимосвязи «многие ко многим», а реализуется лишь взаимосвязь «один ко многим». Если в отношении между данными порожденный элемент (элемент более низкого уровня) имеет более одного исходного элемента, то это отношение уже нельзя описать как иерархическую структуру без дополнительных усложнений. Такие отношения более удобно описывать с помощью сетевой структуры.

Сетевая модель данных подразумевает возможность установления произвольных связей между элементами базы данных. Так, структура «отрасль—завод—продукция» является сетевой структурой, поскольку отношение «завод—продукция» является отношением «многие ко многим». Сетевые структуры гораздо сложнее иерархических в реализации, особенно в том случае, если надо поддерживать отношения «многие ко многим». Сложности реализации проявляются и в сложности работы с базой данных. СУБД, поддерживающие сетевые структуры данных, как правило, сложны для пользователя, особенно неквалифицированного. Для того, чтобы получить какой-либо элемент данных из базы со сложной сетевой структурой, необходимо хорошо разбираться в структуре данных и кропотливо пробираться через дебри записей и связей. В связи с появлением таких систем возник даже термин «навигация в базе данных».

Итак, иерархические структуры не могут отразить все взаимосвязи элементов данных во многих приложениях, а сетевые структуры весьма сложны в реализации и использовании. Выходом из этого положения, по мнению специалистов, является использование третьего — реляционного подхода к представлению баз данных, предложенного Коддом (от английского relation — отношение) [11].

Реляционная модель данных организует объекты и взаимосвязи между ними в виде таблицы, причем взаимосвязи также рассматриваются в виде объектов. В ее основе лежит хорошо проработанная теория отношений, формализующая взаимосвязи между объектами базы. Поскольку любая сетевая структура может быть с некоторой избыточностью разложена в совокупность древовидных структур, то и любое представление данных может быть сведено с некоторой избыточностью к двумерным таблицам (файлам). При этом связи между данными могут быть также представлены в виде двумерных файлов. Заранее имеющаяся избыточность не должна настораживать, поскольку речь идет о логическом представлении данных, физическое же отображение данных, соответствующее этому логическому, может и должно быть избыточным. Процесс приведения произвольной структуры к табличному виду, выполняемый строгими методами, носит название нормализации. В процессе нормализации элементы данных группируются в таблицы, представляющие объекты и их взаимосвязи. Теория нормализации основана на том, что устанавливается полная функциональная зависимость неключевых атрибутов от первичного ключа, исключая повторяющиеся группы элементов данных и транзитивная зависимость между неключевыми атрибутами.

Достоинством реляционной модели является то, что двумерные таблицы легко и просто описать математически и определить операции над ними. Основными свойствами таблиц являются следующие: каждый элемент таблицы представляет собой один элемент данных, повторяющиеся группы отсутствуют; все столбцы (или домены) в таблице однородны, т. е. все элементы домена имеют одинаковую природу; доменам однозначно присвоены имена; в таблице нет двух одинаковых строк (или кортежей); в операциях с таблицей ее домены и кортежи могут просматриваться в любом порядке и в любой последовательности безотносительно к их информационному содержанию и смыслу. Таблицы, обладающие такими свойствами, называются **о т н о ш е н и я м и**. Термин «отношение» является сугубо математическим, однако в нем заключен и некоторый прагматический смысл: рассмотренные двумерные таблицы выражают отношение между составляющими их доменами. Каждый кортеж должен иметь идентификатор (ключ), значение которого однозначно определяет кортеж. В качестве ключа может выступать значение одного (простой ключ) или нескольких (составной ключ) полей данных (как и раньше, ключевые поля обозначаются звездочкой).

Рассмотрим процесс нормализации для сетевой структуры данных по отраслям. Для этого необходимо уточнить смысл изображенных связей. Пусть связь «отрасль—завод» имеет смысл «отрасль состоит из заводов», связь «завод—продукция» фактически двойная и имеет смысл «завод производит продукцию»

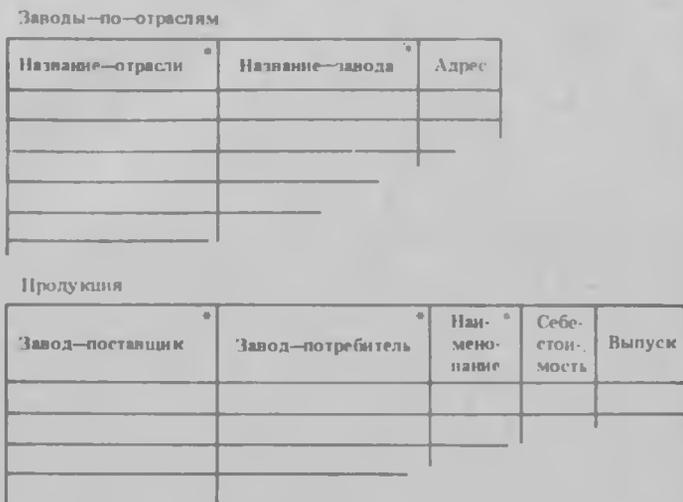


Рис. 5.8. Нормализация структуры данных по отраслям расщеплением на два отношения

и «завод потребляет продукцию». На рис. 5.8 показана структура данных после нормализации. Из рисунка видно, что для реализации связей введены дополнительные домены в отношении «Продукция», которые будут дублировать поле «Название—завода» отношения «Заводы—по—отраслям».

Представление структур данных в виде отношений обладает тем достоинством, что позволяет легко реализовать такие операции над отношениями, как разрезание и склеивание, которые дают возможность произвольно формировать новые отношения из уже существующих.

Языки СУБД. Как и любая программная система, СУБД имеет свои собственные языковые средства. С помощью этих средств решаются три важные задачи: описание баз данных, обеспечение доступа прикладных программ к базам данных, обеспечение доступа пользователей через терминалы непосредственно к базам данных. Соответственно в каждой СУБД имеются две группы языков: языки описания данных (ЯОД) и языки манипулирования данными (ЯМД). Как явствует из их названия, ЯОД предназначены для облегчения составления описаний структур данных, хранимых в банке, а ЯМД предназначены для непосредственной работы с данными.

Важнейшая функция ЯОД состоит в присвоении имен данным. Имена могут присваиваться как элементарным данным, так и различного рода совокупностям элементарных данных. Важное

значение имеют правила, по которым образуются имена данных. В любом случае имена данных должны быть высокопомемочными, чтобы обеспечить самодокументируемость описания данных.

Другой важной функцией ЯОД является отображение логической структуры данных на физическую структуру хранения (привязка). Существуют такие БД, в которых функции именования и привязки поделены между двумя различными ЯОД: один ЯОД привязывает общую структуру данных к физической памяти, а другой ЯОД на основе общей структуры (схемы) имеет доступ подсемьи, доступные прикладным программам [12].

Еще одной функцией ЯОД является присвоение характеристик данным. Характеристики могут быть самые разнообразные, но обычно это основание системы счисления и разрядность (или длина). В некоторых системах характеристики данным не присваиваются: все данные рассматриваются просто как области памяти, а трактовка их содержимого осуществляется самими прикладными программами.

И, наконец, последняя функция ЯОД заключается в присвоении структурных свойств данным. Здесь появляется терминологическая путаница в определении «совокупности данных», поэтому, чтобы упростить изложение, примем в качестве основной терминологию какой-либо системы, например ИНЭС [13].

Основные совокупности данных: элементарное данное — данное, которое не имеет составных частей; структура — поль или более не обязательно однотипных элементарных данных и(или) структур и(или) массивов; массив — поль или более однотипных структур; нумерованный массив — массив, в котором составляющие его структуры пронумерованы, а доступ к ним может осуществляться по номеру; ключевой массив — массив, в котором одно из элементарных данных, входящих в составляющие массив структуры, является ключом, по которому может быть осуществлен доступ к структурам.

Итак, ЯОД присваивает совокупностям данных такие свойства, от которых зависит способ их размещения и метод их поиска.

Следует оговориться, что приведенная терминология системы ИНЭС является неполной: здесь опущены определения, которые позволяют строить базы данных со сложными перекрестными (сетевыми) связями. Сетевая структура данных вообще трудно поддается реализации, поэтому большинство существующих БД ограничиваются иерархическим (древовидным) представлением структуры данных [10, 14—16], это относится и к приведенной здесь терминологической выдержке.

Схема работы процессора ЯОД стандартна: на вход подается символическое описание данных на ЯОД, на выходе получается описание данных в некоторой внутренней форме (обычно таблицы), с которым может работать СУБД. Обычно трансляция описания данных представляет собой независимый процесс и выполняется

как отдельное задание перед созданием базы данных. По синтаксису ЯОД бывают следующими: языком фиксированных позиций (таблиц, форм); языком разделителей; языком ключевых слов; свободным повествовательным языком; диалоговым языком [14].

Рассмотрим подробнее использование ЯОД для описания структуры данных.

Пусть для проектирования некоторого класса технологических схем необходимо иметь базу данных следующей структуры (рис. 5.9). В этой структуре «Тип» является массивом, отображающим

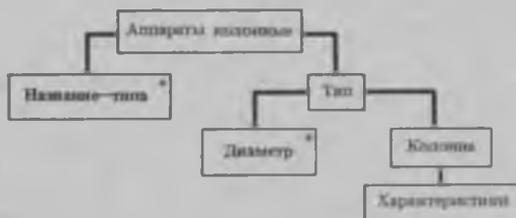


Рис. 5.9. Структура базы данных «Аппараты колонные»

тот факт, что колонные аппараты могут быть разных типов. «Название—тип» является ключом, по которому будет производиться поиск. Точно также «Колонна» является массивом и ключом «Диаметр». Это соответствует тому факту, что колонные аппараты одного типа имеют несколько различных стандартных диаметров. Под «Характеристиками» подразумеваются некоторые прочие характеристики колонны, такие, как материал, из которого изготовлена колонна, толщина стенок, высота колонны и т. п.

Таким образом, структура базы данных представляет собой два ключевых массива, вложенных один в другой. Физически такая структура может быть реализована в виде двух физических наборов данных: один соответствует массиву «Тип», другой — массиву «Колонна». Другой способ реализации — все данные содержатся в одном наборе данных, а их структура поддерживается с помощью развитой системы различных указателей (конечно же, указатели являются служебной информацией и скрыты от пользователя) [13]. Кроме того, описание данных может занимать отдельный набор данных, либо может находиться в том же наборе данных, что и собственно данные [14]. Существуют и другие методы физической реализации баз данных, например инвертированные списки [10]. Следует отметить, что пара описание данных—собственно данные не является жесткой: одному и тому же описанию данных могут соответствовать различные данные (в приведенном выше примере это соответствует различным отраслевым нормалам).

Опишем изображенную структуру на языках описания данных двух широко известных СУБД общего назначения: ОКА [17] и ИИЭС [13]. Описание базы данных «Аппараты колонные» на

```

DBD      NAME=COLUMNS
SEGM     NAME=ТYP, BYTES=50, PARENT=0, FREQ=10
FIELD    NAME=(TYP CODE, SEQ, U), BYTES=50
SEGM     NAME=COLUMN, BYTES=54, PARENT=ТYP, FREQ=20
FIELD    NAME=(DIAMETER, SEQ, U), BYTES=4, TYPE=X
FIELD    NAME=ANYDATA, BYTES=50, START=5
SEGM     NAME=CHARACT, PARENT=COLUMN, BYTES=54, FREQ=50
FIELD    NAME=(NAME, SEQ, U), BYTES=50, START=1, TYPE=C
FIELD    NAME=DATA, BYTES=4, TYPE=X, START=51
SEGM     NAME=DATAS, PARENT=CHARACT, FREQ=10, BYTES=4
FIELD    NAME=ELEMENT, TYPE=X, BYTES=4
DBDGEN
FINISH
END

```

Рис. 5.10. Описание базы данных «Аппараты колонные» на ЯОД системы ОКА

ЯОД системы управления базами данных ОКА выглядит следующим образом (рис. 5.10).

Оператор DBD, которым начинается описание, представляет собой сокращение от data base definition — определение базы данных и выполняет функцию именованной базы данных. Отметим при этом, что в СУБД ОКА любые имена не должны превышать в длину 8 символов, должны начинаться с буквы латинского алфавита и не должны содержать специальные символы (в том числе и буквы русского алфавита). Следующий оператор SEGM определяет логический сегмент с именем ТYP длиной 50 байт, который является корневым (PARENT = 0). Параметр FREQ задает ожидаемую частоту повторения данного сегмента (т. е. в базе данных планируется хранить информацию не более чем о 10 типах колонных аппаратов). Следующий оператор FIELD определяет поле, входящее в сегмент с именем ТYP, как элемент символьного типа (по умолчанию) длиной 50 символов. Этому полю присваивается имя TYP CODE. Кроме того, списковая форма параметра NAME указывает на то, что отдельные экземпляры сегмента с именем ТYP упорядочены в базе данных по значениям поля с именем TYP CODE (подпараметр SEQ), причем допускаются экземпляры сегмента с дублирующими значениями этого поля (подпараметр U).

Сегментом, подчиненным сегменту с именем ТYP, является сегмент с именем COLUMN, на что указывает параметр PARENT = ТYP. Аналогично для сегмента COLUMN определены длина

и ожидаемая частота. Следует подчеркнуть, что по идеологии СУБД ОКА соподчиненные сегменты связываются отношением «один ко многим», т. е. в данном примере каждому экземпляру сегмента TYP может быть подчинено от 0 до 20 экземпляров сегмента с именем COLUMN. В сегменте COLUMN присутствуют два поля: поле с именем DIAMETER длиной 4 байта и типом X (двоичное кодированное), которое является ключом упорядочивания сегмента COLUMN и имеет уникальные значения (параметры SEQ, U), и поле с именем ANYDATA, длиной 50 символов, начиная с пятого символа в сегменте. В поле DIAMETER будет содержаться число с плавающей точкой, задающее диаметр колонного аппарата. Тип X для этого поля задан по той простой причине, что в системе ОКА не предусмотрен тип «плавающей». В поле ANYDATA может содержаться какой-либо поясняющий текст или данные в символьном виде. Следующий оператор SEGM определяет сегмент с именем CHARACTER, подчиненный сегменту с именем COLUMN. Этот сегмент состоит из двух полей: поля NAME символьного типа длиной 50 байтов, которое является ключом упорядочивания экземпляров сегмента CHARACTER с уникальными значениями и содержит название числовой характеристики колонного аппарата, и поля DATA двоичного кодированного типа X длиной 4 байта, которое содержит числовое значение характеристики (возможно, в плавающей форме). Последний сегмент с именем DATAS подчинен сегменту с именем CHARACTER и состоит из одного поля ELEMENT двоичного кодированного типа длиной 4 байта. Смысл этого сегмента заключается в том, что он представляет собой вектор из нескольких (от 0 до 10) простых элементов, отражая тот факт, что характеристики колонного аппарата с названием NAME могут являться сразу несколько числовых значений. И, наконец, операторы DBDGEN, FINISH и END заканчивают описание структуры базы данных, выполняя некоторые служебные функции. Вообще синтаксис ЯОД СУБД ОКА аналогичен синтаксису языка ассемблер ОС ЕС ЭВМ. Причина этого проста: транслятор ЯОД системы ОКА реализован в виде набора ассемблеровских макроопределений, а сами операторы ЯОД представляют собой макрокоманды ассемблера.

ЯОД СУБД ИНЭС значительно отличается от ЯОД системы ОКА, поскольку построен с использованием других концепций. Описание базы данных «Аппараты колонные» на этом языке представлено на рис. 5.11. Первый оператор DEFAULT представляет собой оператор умолчания и применяется ко всему описанию, когда явно не указано каких-либо альтернатив. В данном случае этот оператор предписывает сохранить нижеследующий порядок вершин в дереве описания данных (ДОД), в противном случае вершины ДОД были бы расположены в алфавитном порядке их имен.

```

DEFAULT ORDER=YES;
АППАРАТЫ КОЛОННЫЕ: STRUCT(
  ARRAY(STRUCT/KEY=НАЗВАНИЕ, SEP=YES/(
    НАЗВАНИЕ: CHAR/SIZE=50/;
    ТИП: ARRAY(STRUCT/KEY=ДИАМЕТР/(
      ДИАМЕТР: REAL/SIZE=4/;
      КОЛОННА: STRUCT(
        ХАРАКТЕРИСТИКИ: ARRAY/SIZE=50/(
          STRUCT/KEY=НАЗВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ/(
            НАЗВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ: CHAR;
            ДАННЫЕ: ARRAY/SIZE=10/(
              REAL)))))))); END;

```

Рис. 5.11. Описание базы данных «Аппараты колонные» на ЯОД системы ИНЭС

Следующий оператор по синтаксису представляет собой полное описание структуры базы данных. Всей базе данных присваивается имя «Аппараты колонные». «Аппараты колонные» — это структура, состоящая из одного элемента, который является ключевым массивом с ключом с именем «Название». Элементом этого массива является структура, состоящая из двух элементов: символьного элемента длиной до 50 символов с именем «Название» (он является ключом поиска) и ключевого массива «Тип». Параметр $SEP = YES$ задает оптимизацию физического размещения данных на внешнем носителе, предписывая выделение данной структуры в отдельные блоки при переполнении дерева данных. Элементом массива «Тип» является структура, состоящая из двух элементов: числа с плавающей точкой размером 4 байта с именем «Диаметр» (этот элемент является ключом поиска) и элемента с именем «Колонна», который сам является структурой. Структура «Колонна» состоит всего из одного элемента — ключевого массива с именем «Характеристики».

Параметр $SIZE$ указывает предполагаемое количество элементов массива, эта информация используется при планировании физической структуры хранения с целью ее оптимизации. Каждый элемент ключевого массива «Характеристики» является структурой, состоящей из двух элементов: символьной строки с именем «Название характеристики», которая является ключом поиска, и простого массива с именем «Данные» ориентировочной размерности 10, элементом которого является число с плавающей точкой. Последний оператор END завершает описание структуры базы данных. Как мы видим, ЯОД системы ИНЭС имеет свободный формат и правильную скобочную структуру, схожую со структурой

языка ЛИСИ. В соответствии с такой структурой ЯОД транслятор с него реализован на языке рекурсивной обработки текстов РЕФАЛ.

Завершая обсуждение языков описания данных, отметим, что выбор какого-либо типа ЯОД, по-видимому, не играет большой роли, поскольку определение данных, в отличие от их использования, производится достаточно редко. Гораздо больший интерес представляют возможности ЯОД в части описания сложных структур и связей данных.

Языки манипулирования данными делятся в свою очередь на две группы: языки, обеспечивающие элементарные операции над данными (чтение, запись, удаление и т. д.), т. е. собственно ЯМД, и языки высокого уровня, позволяющие в более или менее естественной форме формулировать запросы к СУБД (например: «Перечислить фамилии всех студентов, получающих повышенную стипендию и имеющих возраст более 25 лет»), т. е. языки запросов (ЯЗ).

Рассмотрим подробнее языки манипулирования данными. ЯМД, с которым работает программист, должен обеспечивать ему элементарные операции над логическим представлением данных. Функцией ЯМД является интерпретация логического вызова на уровень физического управления данными в соответствии с моделью интерпретации, которая определяется схемой базы данных и ее отображением на структуры физического хранения, контроль полномочий источника вызова по доступу к данным, исполнение вызова, регистрация изменений базы данных в системном журнале.

Очевидными элементарными операциями над данными являются чтение и запись. Часто применяется также операция удаления данного. Из других элементарных операций приведем открытие и закрытие базы данных, перемещение в иерархической последовательности данных (или движение в структурах данных без передачи данных). Операции чтения и записи сами по себе являются достаточно сложными: например, ключевой массив можно читать подряд или по ключу; записывать можно на место, уже занятое каким-либо данным, или на пустое место (т. е. добавлять данные). Добавлять данные можно также по-разному: в начало массива, в конец массива или в середину массива, раздвигая составляющие его структуры.

Все это приводит к тому, что пока нет какого-либо стандарта в отношении ЯМД и в каждой реально существующей системе имеется свой набор элементарных операций над данными. Форма же ЯМД в достаточной степени общепринята: это либо оператор CALL (вызвать подпрограмму) в прикладной программе, либо оператор макровывода (например, макрокоманда в языке ассемблера). Например, в СУБД ОКА следующий оператор выполняет элементарное действие: CALL PLIBET (3, 'GN', FIELD, PCB).

Поэтому оператору, записанному в программе на языке высокого уровня ПЛ-1, над базой данных, определенной блоком коммуникаций программы PCB, будет выполнена операция GN (get next — прочесть следующий сегмент), а результат будет помещен в переменную FIELD. Цифра 3 означает число параметров, а GETSET — подпрограмма в СУБД, которая выполняет функции ЯМД. Результат выполнения этой операции индицируется флажками в блоке коммуникаций программы PCB.

Пример использования языка элементарных операций над данными в системе ИИЭС приведен на рис. 5.12. ЯМД в данном случае реализован в виде набора макроопераций языка ассемблер. Приведенный фрагмент программы читает из базы данных «Аппараты колонные» значение массы роторно-дисковой колонны с диаметром 200. Это производится следующим образом. Команда START начинает любую программу на языке ассемблер. Макрокоманда ACS с меткой OPEN получает память под управляющий блок базы данных (STORE = GET), заносит его адрес в поле ABASE и открывает базу данных по dd — именам ДОД и дерева данных. Следующая макрокоманда DCONK с меткой DOWN производит спуск по ветвям дерева данных в соответствии с траекторией, заданной в поле NAME. В поле памяти с меткой NAME хранится составное имя вершины дерева, к которой можно спуститься. Это имя состоит из иерархической последовательности имен вершин ДОД и значений ключа ключевых массивов. Следующая макрокоманда ACS с меткой READ производит чтение из текущей вершины дерева данных в область памяти с меткой FIELD (двойное слово). Макрокоманда ACS с меткой CLOSE закрывает базу данных и освобождает память из-под управляющего блока (STORE = FREE). И, наконец, команда END заканчивает программу на языке ассемблер.

Как можно заметить, в различных СУБД подход к построению ЯМД осуществляется с принципиально разных позиций, причем разница в синтаксисе и семантике различных ЯМД имеет гораздо большее значение, чем для ЯОД.

Языки запросов находятся на более высоком уровне по своим возможностям манипулирования данными. При использовании этих языков программисту не нужно детально описывать перемещения в базе данных и другие операции. Вместо этого формулируется условный запрос на данные, например: «Отобразить характеристики всех колонных аппаратов типа «насадочные» с диаметром более 500 и менее 700 и вывести на печать». Этот запрос не является, конечно, примером какого-либо конкретного ЯЗ (13, однако он хорошо демонстрирует основные черты всех ЯЗ (13, 14, 16—21). По своим типам ЯЗ аналогичны ЯОД, причем чаще всего употребляются язык разделителей (как автономно, в виде отдельного задания, так и в виде оператора CALL в языках программирования высокого уровня) и диалоговый язык.

```

      START
      . . .
OPEN  ACS      ABASE,R=(OPEN),STORE=GET,DDNAME=(DOD,DD)
DOWN  DCONK    ABASE,NAME
READ  ACS      ABASE,R=,V=FIELD
      . . .
CLOSE ACS      ABASE,R=CLOSE,STORE=FREE
      . . .
FIELD DS      D
NAME  DC      С'АППАРАТЫ КОЛОННЫЕ.РОТОРНО-ДИСКОВЫЕ.'
      DC      С'200.КОЛОННА.МАЩА.ДАНИЕ/
      . . .
      END

```

Рис. 5.12. Фрагмент программы на языке ассемблер, иллюстрирующий элементарные операции над данными в системе ИИЭС

```

BETPLI:PROC(PCB) OPTIONS(MAIN);
DCL PLIBET ENTRY(BIN FIXED(31),CHAR(4),,,),
  1 PCB1 BASED(PTR), 2 DBDNAME CHAR(8), .....
  2 STADCOD CHAR(2), .... 2 PROCOPT CHAR(4), .....
  1 ARGUMENT, 2 TYPSEWGM CHAR(8),
  2 REQUEST CHAR(100) INIT('(DIAMETER<200)'),
  WORK CHAR(54);
      .....
      PTR=ADDR(PCB);
      .....
GO:CALL PLIBET(4,'GU',WORK,PCB,ARGUMENT); .... GOTO GO;
      .....
      END BETPLI;

```

Рис. 5.13. Фрагмент программы на языке ПЛ-1, иллюстрирующий возможности ЯЗ системы ОКА

В качестве конкретных примеров рассмотрим ЯЗ СУБД ОКА и ИИЭС. На рис. 5.13 приведен фрагмент программы на языке ПЛ-1, в котором используются возможности ЯЗ системы ОКА. Смысл этого фрагмента заключается в том, чтобы прочитать из базы данных «Аппараты колонные» все сегменты COLUMN, в которых значение поля DIAMETER меньше 200. Первый оператор программы определяет процедуру BETPLI (это имя в системе

ТА жестко зафиксировано) как главную, имеющую один параметр PCB, представляющий собой поле блока коммуникаций программы. Следующий оператор DECLARE описывает атрибуты параметров точки входа PLIBET (через эту точку входа вызывается ЯМД СУБД ОКА), структуру блока коммуникаций программы и аргумента поиска. Блок коммуникаций программы имеет значительное количество полей, из которых показано только три: поле имени базы данных DBDNAME, поле кода завершения операций ЯМД STATCOD и поле режимов пользователя PROCOPT. Аргумент поиска состоит из двух полей: поля, в котором хранится значение типа сегмента TYPSEGM, и поля REQUEST, в котором находится условие запроса. Символьная переменная WORK предназначена для приема экземпляров сегмента COLUMN. Следующий оператор присваивания накладывает фиктивную секцию PCB1 на блок коммуникаций программы и дает возможность обращаться к его полям. Следующий оператор вызова, выполняющийся в цикле, помещает очередной экземпляр сегмента COLUMN, удовлетворяющий условию запроса, в переменную WORK. Смысл параметров процедуры PLIBET был пояснен ранее. Последний оператор END заканчивает программу на языке ПЛ-1.

Из приведенных примеров видно, что в СУБД ОКА функции ЯМД и ЯЗ выполняет один и тот же процессор. В таком объединении имеются, конечно же, свои положительные и отрицательные стороны. К достоинствам следует отнести прежде всего унификацию программного интерфейса и уменьшение количества специальных языков, которые необходимо изучать. Главным недостатком такого объединения является необходимость знания какого-либо языка программирования для составления даже элементарного запроса.

В отличие от ЯЗ ОКА в СУБД ИНЭС язык запросов реализован отдельно, и им могут пользоваться и непрограммисты. Рассмотрим простой пример запроса:

АППАРАТЫ КОЛОННЫЕ. (НАСАДОЧНЫЕ, РОТОРНО-ДИСКОВЫЕ)

ТИП. ALL! (ДИАМЕТР <200). КОЛОННА. МАССА. (ДАННЫЕ),

%OUTST ('1')

Этот запрос предписывает распечатать информацию о массе всех колонных аппаратов насадочного и роторно-дискового типа, диаметр которых меньше 200. Составное имя в соответствии с концепциями СУБД ИНЭС записывается в порядке нормального обхода дерева данных (сверху вниз и слева направо) из названий вершин ДООД и значений ключа для ключевых массивов. Ключевое слово ALL обозначает перебор всех вершин дерева данных на

MIXDAT		DATA DICTIONARY		KWANT-M 01.01.46		11-27-85	
REPORT				МХТИ ЛАБОРАТОРИЯ САПР		11:03:5	
				K P I I		E F I L R N D	
LINE	LEVEL	NAME	FORM	SIZE	Y % I U T		
10	02	COMP1	ASC	50	Y 90 N Y Y		
20	02	COMP2	ASC	50	Y 90 N Y Y		
30	02	MIXTYPE	ASC	1	Y 90 N N Y		
40	02	LITNUMB	ASC	3	Y 90 N N Y		
50	02	LITVOL	ASC	3			
60	02	LITPAGE	ASC	4			
70	02	NUMPOINT	ASN	2			
80	01	RG	EXPER				
90	02	X	ASC	12	Y 90 N N Y		
100	02	Y	ASC	12	Y 90 N N Y		
110	02	T	ASC	12	Y 90 N N Y		
120	02	P	ASC	12	Y 90 N N Y		
130	02	XYERR	ASC	12			
140	02	XYTYPE	ASC	1			
150	02	TERR	ASC	12			
160	02	TTYPE	ASC	1			
170	02	PERR	ASC	12			
180	02	PTYPE	ASC	1			
0 ERRORS							

Рис. 5.23. Файл данных «Физико-химические свойства» (экспериментальные данные по бинарному равновесию)

5.4. Требования к СУБД для систем автоматизированного проектирования

СУБД, используемая для создания БД в САПР ХТС, кроме общих требований, предъявляемых к СУБД, должна удовлетворять и специфическим потребностям.

1. СУБД должна обладать как возможностями сопряжения с прикладными программами, так и возможностями диалогового справочно-информационного обслуживания. По своему характеру прикладные программы САПР могут быть как чисто расчетными, работающими без вмешательства человека (например, программа решения системы уравнений материально-теплого баланса), так и диалоговыми, требующими достаточно частых «подсказок» человека, сидящего за удаленным терминалом (например, програм-

MIXMOD		DATA DICTIONARY		KWANT-M 01.01.46		11-27-85	
REPORT				МХТИ ЛАБОРАТОРИЯ САПР		10:05:09	
				K P I I		E F I L R N D	
LINE	LEVEL	NAME	FORM	SIZE	Y % I U T		
10	02	COMP1	ASC	50	Y 90 N Y Y		
20	02	COMP2	ASC	50	Y 90 N Y Y		
30	02	MIXTYPE	ASC	1	Y 90 N N Y		
40	02	MODEL	ASC	10	Y 90 N N Y		
50	02	NUMPARM	ASN	2			
60	01	RG	DATA				
70	02	VECTOR	ASC	12			
80	01	DELTA					
90	02	XMIN	ASC	12			
100	02	XMAX	ASC	12			
110	02	TMIN	ASC	12			
120	02	TMAX	ASC	12			
130	02	FMIN	ASC	12			
140	02	FMAX	ASC	12			
150	01	ERROR					
160	02	YERR	ASC	12			
170	02	YTYPE	ASC	1			
180	02	TERR	ASC	12			
190	02	TTYPE	ASC	1			
200	02	PERR	ASC	12			
210	02	PTYPE	ASC	1			
0 ERRORS							

Рис. 5.24. Файл базы данных «Физико-химические свойства» (параметры моделей по равновесию в бинарных системах)

мы анализа технологических структур). Назначение ЯЗ в САПР ХТС — это решение в терминальном режиме справочно-поисковых задач, возникающих в основном на этапе предпроектных разработок. Кроме того, ЯЗ может быть использован и в прикладных программах как ЯМД высокого уровня.

2. СУБД должна обеспечивать мультизадачную работу на общих базах данных без нарушения достоверности данных. Это требование в применении к СУБД САПР ХТС имеет свою специфику. Предположим, что функционирует некоторая САПР; одновременно решается задача корректировки баз данных и комплекс расчетных задач. Возможны две ситуации. Первая — в СУБД одновременно поступили запросы на корректировку данных и на выборку

текущем уровне. Символ «!» называется символом фильтра и читается «такой, что». Последовательность символов % OUTST ('1') означает вызов подпрограммы с именем OUTST, в качестве параметра которой передается символ '1'. В данном случае OUTST — это стандартная подпрограмма, выводящая в поток SYSOUT стек отобранных данных в форме «Название вершины = значение».

В приведенном примере запроса не показаны богатые возможности языка ЯЗ СУБД ИНЭС. К таким возможностям относятся средства сокращения записи запроса, описания рабочих полей, организации вычислений и вызова подпрограмм по их адресам.

Иногда в СУБД, кроме ЯОД, ЯМД и ЯЗ, включают и процессор языка генератора отчетов [13, 14, 18]. Типичным примером такого процессора является стандартный язык РИГ [22]. Другим языковым процессором, включаемым в некоторых случаях с СУБД, является процессор языка генератора программ ввода и контроля данных [13, 23].

В некоторых БД возможно наличие нескольких языков в одной и той же группе, например: два различных ЯОД, три различных ЯМД и т. д. Причины этого следующие: а) стремление разграничить функции пользователя-прикладника и системного программиста (или администратора БД); б) ориентация ЯМД на различные языки программирования высокого уровня; в) стремление создать семейство дифференцированных языков, учитывающих степень подготовленности пользователя. Опыт эксплуатации БД, однако, показывает, что обилие языковых процессов СУБД затрудняет ее быстрое освоение и эффективное использование.

Администрация банка. Как и всякая большая система, СУБД нуждается в постоянном обслуживании, в связи с чем в СУБД входят специальные обслуживающие программные средства. Эти средства являются относительно редко используемыми программами, с помощью которых выполняется постройка СУБД, регистрация пользователей, установка атрибутов защиты данных, реорганизация баз данных, восстановление баз данных после сбоя системы и т. д.

Поскольку БД предназначен для удовлетворения запросов людей и без них работать не может, его надо рассматривать не как программно-информационную систему, а в более общем плане — как организационно-техническую. Действительно, создание и функционирование БД поддерживается специальным персоналом: администрацией БД и исполнительным персоналом БД. В свою очередь, администрация БД состоит из групп администратора данных и администратора системы. Основные функции администратора данных заключаются в следующем.

1. Организация баз данных: выявление требований к данным, предъявляемых различными приложениями; построение схемы базы данных; определение физической структуры данных; руководство и участие в определении подсхем; загрузка баз данных.

2. Мониторинг: управление текущей работой, включая создание специальных программ обслуживания баз данных (по крайней мере на уровне постановки задач и разработки алгоритмов); актуализация баз данных, управление архивированием; управление восстановлением потерянных данных; наблюдения за работой системы (ведение журнала и статистики, анализ функционирования банка данных).

3. Реорганизация: определение необходимости реорганизации баз данных на основе анализа работы системы и (или) появления новых требований к данным; логическая реорганизация баз данных; физическая реорганизация баз данных; удаление неиспользуемых данных и уплотнение используемого пространства носителей.

Очевидно, что администратор данных по своей квалификации может и не быть программистом, однако он обязан быть специалистом в предметной области.

Функции администратора системы состоят в следующем: на основе изучения приложений, а также требований администратор данных определяет необходимый состав программных компонентов БД, режимы их функционирования, качественные и количественные параметры генерации, а также конфигурацию технических средств БД; проводит генерацию программных средств; планирует выполнение работ на вычислительной установке; осуществляет сбор статистики об общей работе вычислительной установки и ее анализ; обеспечивает восстановление состояния системы при возникновении сбоев; обеспечивает оперативное управление работой системы.

В свою очередь, исполнительный персонал производит обслуживание технических средств БД, подготовку данных, обслуживание хранилища данных и т. д.

5.3. Проектирование баз данных

Создание базы данных, удовлетворяющей текущим и перспективным информационным потребностям пользователя (системы), связано с необходимостью выполнения нескольких этапов проектирования. Сюда относятся: разработка концептуальной модели предметной области, отображение концептуальной модели на логическую модель данных, создание физической модели базы данных. Эффективность функционирования БД в равной степени зависит от оптимальности решения задач на каждом из этапов.

Проектирование концептуальной модели. Оно основано на анализе решаемых в рамках САПР задач с точки зрения используемой информации. На этом этапе необходимо систематически исследовать состав входных и выходных данных каждой из прикладных программ, работающих совместно с базой, определить совокупности данных и запросов, установить общеприемлемую

STANDART DATA DICTIONARY				КВАНТ-М 01.01.46		11-27-85	
REPORT				МХТИ ЛАБОРАТОРИЯ САПР		10:05:31	
LINE	LEVEL	NAME	FORM	SIZE	K	P	I
					Y	%	I
10	02	VID	ASC	20	Y	90	N Y Y
20	02	TYPE	ASC	20	Y	90	N N Y
30	02	GOST	ASC	10	Y	90	N N Y
40	02	CHARMAIN	ASC	12	Y	90	N N Y
50	02	CHARNAME	ASC	20	Y	90	N N Y
60	01	RG NEXTDAT					
70	02	NAME	ASC	20	Y	90	N N Y
80	02	VALUE	ASC	12	Y	90	N N Y
90	02	UNITS	ASC	10			
0 ERRORS							

Рис. 5.25. Файл базы данных «Технологическое оборудование» (типовые элементы)

ELEMENTS DATA DICTIONARY				КВАНТ-М 01.01.46		11-27-85	
REPORT				МХТИ ЛАБОРАТОРИЯ САПР		10:06:08	
LINE	LEVEL	NAME	FORM	SIZE	K	P	I
					Y	%	I
10	02	ELTYPE	ASC	20	Y	90	N Y Y
20	02	ELVID	ASC	20	Y	90	N Y Y
30	02	ALGORITHM	ASC	3	Y	90	N N Y
40	02	ELNUM	ASC	3	Y	90	N N Y
50	02	INPUT	ASN	2			
60	02	OUTPUT	ASN	2			
0 ERRORS							

Рис. 5.26. Файл базы данных «Технологические схемы» (типовые элементы)

этих же самых данных. При этом может статься, что результат выборки будет неопределен, либо выборка будет произведена после корректировки, либо корректировка будет произведена после выборки. Вторая ситуация — из комплекса расчетных задач был сделан запрос на какие-либо данные, после чего эти

FLOWS REPORT		DATA DICTIONARY		KWANT-M 01.01.46		11-27-85	
				МХТИ ЛАБОРАТОРИЯ САПР		10:06:21	
LINE	LEVEL	NAME	FORM	SIZE	Y %	K P I I E FIL R N D I U T	
10	02	FLOW	ASN	4	Y 90	N Y Y	
20	02	SHEMA	ASN	3	Y 90	N N Y	
25	02	NUMPROP	ASN	2			
30	01	RG PROPERTY					
40	02	TYPE	ASC	10	Y 90	N N Y	
50	02	VALUE	ASC	12			
60	02	UNITS	ASC	10			
0 ERRORS							

Рис. 5.27. Файл базы данных «Технологические схемы» (потоки и их свойства)

SHEMA REPORT		DATA DICTIONARY		KWANT-M 01.01.46		11-27-85	
				МХТИ ЛАБОРАТОРИЯ САПР		10:06:39	
LINE	LEVEL	NAME	FORM	SIZE	Y %	K P I I E FIL R N D I U T	
10	02	SHEMA	ASN	3	Y 90	Y N Y	
20	02	NUMELEM	ASN	3	Y 90	N N Y	
30	02	INPUT	ASN	3			
40	02	OUTPUT	ASN	3			
50	01	RG INP					
60	02	INPFLOW	ASN	3	Y 90	N N Y	
70	02	OUTELEM	ASN	3	Y 90	N N Y	
80	01	RG OUT					
90	02	OUTFLOW	ASN	3	Y 90	N N Y	
100	02	INPELEM	ASN	3	Y 90	N N Y	
0 ERRORS							

Рис. 5.28. Файл базы данных «Технологические схемы» (данные по схеме)

LITERAT		DATA		DICTIONARY		KWANT-M 01.01.46		11-27-85	
REPORT						МХТИ ЛАБОРАТОРИЯ САПР		10:05:49	
LINE	LEVEL	NAME	FORM	SIZE	K	P	I	I	
					E	FIL	R	N	D
10	02	LITNUMB	ASC	3	Y	90	Y	N	Y
20	02	AUTHORS	ASC	60	Y	90	N	N	Y
30	02	NAME	ASC	60	Y	90	N	N	Y
40	02	CITY	ASC	20	Y	90	N	N	Y
50	02	PUBLISH	ASC	20	Y	90	N	N	Y
60	02	YEAR	ASC	4	Y	90	N	N	Y
0 ERRORS									

Рис. 5.29. Файл базы данных «Литературные источники»

данные были оперативно откорректированы, а затем (возможно, через большой промежуток времени) уже из другой программы комплекса расчетных задач снова был сделан запрос на те же самые данные. В этом случае возможно привнесение ошибки в конечный результат расчетов, и полученный проект окажется как минимум неоптимальным, а возможно, и вообще нереализуемым. Известные в настоящее время СУБД общего назначения более или менее хорошо справляются с первой ситуацией [10, 14], для обработки же второй ситуации необходимо принятие каких-либо дополнительных мер. Один из вариантов решения этой проблемы — хранить в базе данных для каждого данного системно поддерживаемый и доступный прикладным программам счетчик обновлений данного.

3. СУБД должна иметь средства защиты данных от несанкционированного доступа. Защита данных должна быть двух видов: защита от изменения (при этом возможно только чтение данных) и защита от чтения (при этом несанкционированный доступ к данным вообще запрещен). В подавляющем большинстве известных СУБД обеспечивается парольная защита данных. Однако в некоторых системах функции защиты возложены на операционную систему, в других же системах защита осуществляется не на уровне отдельного элемента данных, а на уровне хранимых совокупностей данных, в то время как для СУБД в САПР ХТС желательно защита данных на уровне каждого элементарного данного.

4. СУБД не должна накладывать никаких ограничений на прикладные программы; желательно, чтобы она не изменяла базовый язык высокого уровня, на котором пишутся прикладные программы. Поясним это требование. Известны СУБД, которые

создают свою «среду» в операционной системе [12, 16, 17]. Прикладные программы либо «плавают» в этой среде, либо выполняются под управлением контроллера СУБД, т. е. являются подпрограммами СУБД. Естественно, что о выполнении таких программ без СУБД даже не может быть и речи. Между тем такая зависимость (или мобильность) прикладных программ очень важна для ускорения процесса создания прикладных программ, их отладки и скорейшего внедрения. Другой пример ограничений — СУБД, расширяющая базовый язык [18, 27]. Понятно, что прикладная программа, написанная на таком расширенном и поэтому нестандартном языке, не может быть выполнена без помощи СУБД. Исключением является использование аппарата для расширения языка, предусмотренного в стандарте на язык (например, препроцессорных операторов в языке ПЛ-1). В этом случае, изменяя смысл расширяющих операторов, можно добиться мобильности переходных текстов программ.

5. СУБД должна поддерживать сложные структуры данных. Некоторые из известных СУБД поддерживают только иерархические структуры данных [10, 14]; другие СУБД допускают сетевую организацию данных, но при этом прикладным программам передаются только иерархические подструктуры [12, 17]. СУБД САПР ХТС должна допускать восприятие сетевой и циклической структур данных прикладными программами.

6. СУБД должна включать в себя вспомогательные и специфические для САПР ХТС программы. Так, например, для заполнения баз данных в некоторых СУБД предусмотрены программы ввода данных [13]. Эти программы читают входные документы, подготовленные вручную, производят форматный и логический контроль и записывают данные в базу данных. Специфика баз данных в САПР ХТС заключается в том, что многие элементарные данные взаимосвязаны, т. е. одно данное может быть определено по совокупности других, однако такие расчеты занимают слишком много времени, чтобы производить их при каждом обращении к данным. Поэтому целесообразно проводить такие расчеты только один раз — при заполнении баз данных. Это свойство баз данных в САПР ХТС сформулировано в работе [28] как «самозаполняемость» баз данных. Пример — база данных «Физико-химические свойства». При заполнении базы данных для каждого вещества определяются только минимально необходимые данные, а все остальные данные рассчитываются специальными программами в СУБД. Другой вид прикладных программ, включаемых в СУБД САПР ХТС, — это программы, подсоединяемые к интерфейсу «База данных—прикладные программы» и выполняющие специфические преобразования хранимых данных в форму, удобную для прикладных программ, либо осуществляющие расчет каких-либо данных, хранение которых в базе данных не является целесообразным. Вопрос о прикладных программах в силу их непо-

средственного отношения к САПР ХТС является чрезвычайно важным, поэтому рассмотрим его отдельно.

Прикладные программы. Из прикладных алгоритмов, которые можно включить в СУБД САПР ХТС, наиболее подробно разработаны алгоритмы расчета физико-химических свойств [29, 30]. Это объясняется тем, что, во-первых, физико-химические свойства веществ в значительной степени взаимосвязаны, что отражено в виде теоретических, полу- и полностью эмпирических зависимостей в большом количестве работ, например [31—33]; во-вторых, физико-химические данные являются наиболее часто используемыми в процессе проектирования, а их точность полностью определяет качество проектирования. Следует отметить, что при разработке некоторых систем информационного обеспечения САПР ХТС [29, 34] основное внимание уделялось не организации эффективного хранения и использования данных, а составлению прикладных алгоритмов расчета физико-химических свойств. Важной проблемой, возникающей при создании таких алгоритмов, является определение круга физико-химических свойств, взаимосвязанных друг с другом, и поиск связывающих их зависимостей. Критерием оптимальности совокупности таких зависимостей следует считать компромиссное удовлетворение одновременно нескольким требованиям: время расчета должно быть невелико; точность расчета должна быть как можно более высокой; количество исходных данных должно быть минимальным; исходные данные должны быть доступными.

Важнейшим требованием к алгоритму расчета физико-химических свойств является анализ распространения погрешностей в ходе расчета. Следует отметить, что стремление использовать БД в различных приложениях автоматизированного проектирования ХТС значительно расширяет круг необходимых физико-химических свойств и поэтому задача определения такого круга, несложная для одного конкретного приложения [29, 34], становится весьма трудоемкой для отраслевого БД.

Другой тип прикладных алгоритмов, включаемых в СУБД САПР ХТС,— это алгоритмы оценки параметров. Необходимость в таких алгоритмах обуславливается, во-первых, стремлением к единообразию формы представления физико-химических свойств, а во-вторых, необходимостью обработки экспериментальных данных с целью получения более компактной формы данных. Большинство алгоритмов оценки параметров основывается на методе наименьших квадратов, тем не менее структура самих алгоритмов весьма сильно зависит от характера и свойств выборки данных. Так, например, для оценки коэффициентов полинома степени n , которым аппроксимируются температурные зависимости физико-химических свойств, достаточно решить систему линейных нормальных уравнений. Для оценки коэффициентов уравнения Антуана, описывающего зависимость давления насыщенных паров

чистого компонента от температуры, предложен более сложный итерационный алгоритм [35], в котором осуществляется пошаговый поиск одного из параметров. На каждом шаге поиска при фиксированном значении этого параметра значения остальных коэффициентов находятся решением системы нормальных уравнений.

Более сложной задачей является оценка параметров моделей межфазного равновесия, например парожидкостного. Все существующие в настоящее время модели парожидкостного равновесия являются m -откликовыми, где m — количество компонентов в смеси. Каждый отклик представляет собой $\gamma_i(P)$ где γ_i — коэффициент активности i -го компонента, а P — вектор параметров модели. Большинство исследователей, решая эту задачу, намеренно упрощают ее, явно или неявно объединяя m откликов в один, однако упрощение при этом получается лишь видимое. В работе [36] показано, что суммарный отклик представляет собой сложную многоэкстремальную функцию, поиск глобального экстремума которой является весьма трудным. Задачи такого рода целесообразно решать с помощью универсальных методов оценки параметров.

Сложным вопросом является также и выбор самих аппроксимирующих зависимостей. В некоторых случаях зависимости, аппроксимирующие экспериментально измеренные физико-химические свойства, являются модельными, при этом возникает проблема стандартизации этих моделей. В других случаях, когда данные аппроксимируются какими-либо эмпирическими зависимостями, необходимо решать задачу выбора вида зависимости, оптимально приближающей экспериментальные данные, для каждого физико-химического свойства. Известны попытки выбора таких зависимостей [37], однако в целом использование полученных разнородных данных затрудняется. Поэтому целесообразен выбор какой-либо эмпирической зависимости, аппроксимирующей оптимальным образом достаточно большое подмножество требуемых физико-химических свойств. В работе [34] большинство зависимостей физико-химических свойств от температуры аппроксимировалось полиномиальными уравнениями, однако выбор такой аппроксимации был сделан не на основе анализа оптимальности, а исходя из практических соображений. В целом направление дальнейшего прогресса в этой области заключается, очевидно, в использовании сплайнов для аппроксимации физико-химических данных.

Другая группа прикладных алгоритмов, включаемых в СУБД САПР ХТС, — это алгоритмы преобразования данных, хранимых в БД, в более удобную для прикладных программ форму. Характерными чертами таких алгоритмов являются их сложность, независимость от решаемых САПР задач и привязка к базам данных. К таким алгоритмам относятся, например, алгоритмы расчета физико-химических свойств смесей нескольких компонентов. Трудности, возникающие при создании таких алгоритмов, того же

порядка, что и для расчета физико-химических свойств чистых веществ: сложность выбора расчетных методик и повышенные требования к качеству расчета.

Алгоритм расчета многокомпонентного равновесия также можно причислить к алгоритмам преобразования данных. В настоящее время многокомпонентное равновесие рассчитывается обычно на основе бинарных равновесных данных, при этом накладываются очень жесткие ограничения на время расчета, поскольку в специфике проектирования массообменных процессов расчет межфазного равновесия является одним из наиболее интенсивно используемых алгоритмов. В связи с этим следует отметить работы [38, 39], в которых предложены методы расчета многокомпонентного равновесия, значительно экономящие время.

К группе алгоритмов преобразования данных относятся также алгоритмы выбора технологического оборудования. Выбор оборудования при известном его типе обычно осуществляется по фиксированному набору определяющих параметров и является в значительной мере автономным процессом в том смысле, что он в большинстве случаев не зависит от характеристик проектируемого процесса. Гораздо сложнее задача определения необходимого типа оборудования, обеспечивающего минимальные затраты при заданной производительности. В лучшем случае эта задача решается качественно с помощью логического анализа особенностей реализуемого технологического процесса и накопленного опыта, в других же случаях выбор типа оборудования производится в значительной степени интуитивно и в соответствии со сложившимися традициями. В то же время желательно, чтобы эта задача решалась численно с учетом количественных характеристик как самого оборудования, так и технологических потоков и окружающей среды.

И, наконец, последний вид алгоритмов преобразования данных — это алгоритмы определения близости технологий в целом, преобразующие всю совокупность данных о технологии в набор чисел, имеющий смысл координат технологии в технологическом пространстве, однозначно соответствующий данной технологии. Основной трудностью при создании таких алгоритмов является построение такого технологического пространства, которое было бы метрическим, т. е. расстояние между двумя точками которого служило бы мерой близости двух соответствующих технологий.

Итак, круг прикладных программ, которые должны быть в обязательном порядке включены в СУБД САПР ХТС в силу их независимости от конкретных решаемых задач и сильной привязки к хранимым в БД структурам данных, весьма широк, и разработка таких программ должна проводиться на едином системном подходе, который заключается в анализе используемых структур данных с целью определения требований к базам данных в САПР ХТС.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Shaw J. A.* Data for engineering design // *AichE Symp. Ser.* 1984. Vol. 80, N 237. P. 43—49.
2. *Downey J. R.* The role of the data design laboratory // *Ibid.* P. 116—122.
3. *Liley P. E.* Thermodynamical properties research at CINDAS and Purdue university // *Ibid.* P. 16—24.
4. *Olien N. A., Raveche H. J.* Thermodynamical property data generated by the NBS-Center for chemical engineering // *Ibid.* P. 101—107.
5. *Сычев В. В., Спиридонов Г. А.* Теплофизические информационно-решающие системы. Центр данных по термодинамическим свойствам газов и жидкостей // *Вестн. АН СССР.* 1984. № 10. С. 28—38.
6. *Фалин В. А., Ветозин В. П., Потапов В. И.* Создание банка физико-химических характеристик химических растворов и особо чистых веществ // *Тр. ИРЕА.* 1983. Вып. 3. С. 21—26.
7. *Кафаров В. В., Ветозин В. П.* Банк данных по физико-химическим свойствам веществ // *Информ. бюл. СЭВ по хим. технологии.* 1982. № 5. С. 38—40.
8. *Уинстон П.* Искусственный интеллект. М.: Мир, 1980. 519 с.
9. *Клецов А. С.* Представление знаний // *Прикладная информатика: Финансы и статистика.* М.: 1983. Вып. 1. С. 49—94.
10. *Мартин Дж.* Организация баз данных в вычислительных системах. М.: Мир, 1978. 616 с.
11. *Codd E. F.* A relational model for large shared data base // *Communs ACM.* 1970. Vol. 13, N 6. P. 377—387.
12. *Form Management System IBM/360. General Information Manual. Form GN20—0765.*
13. *Пакет прикладных программ «Информационно-экономическая система»: ИПП ИИЭС—на—базе ОС ЕС. Калинин: ИПО «Центрирограммсистем», 1979. 7 с.*
14. *Информационные системы общего назначения: (Аналит. обзор систем управления базами данных). М.: Статистика, 1975. 471 с.*
15. *Мидоу Ч.* Анализ информационных систем. М.: Прогресс, 1977. 400 с.
16. *Еникеева Е. Х. и др.* Система телеуправления данными КАМА // *УС и М.* 1976. № 6. С. 52—58.
17. *Андон Ф. И., Довгополый В. Г. и др.* Основные положения системы управления базами данных ОКА // *УС и М.* 1977. № 2. С. 28.
18. *Олле Т. В.* Предложения КОДАСИЛ по управлению базами данных. М.: Финансы и статистика, 1981. 286 с.
19. *Хенли Дж.* Автоматизированная библиотека и информационные системы. М.: Мир, 1974. 119 с.
20. *Буханева Э. И.* Моделирование смысла термина информационно-поискового языка. М.: Машиностроение, 1978. 48 с.
21. *Копылов В. А.* Построение автоматизированных информационно-поисковых систем. М.: Энергия, 1974. 145 с.
22. *Липень Ю. М. и др.* Программирование на РИГ в ЕС ЭВМ. М.: Статистика, 1977. 168 с.
23. *Генератор программ ввода данных для ЕС ЭВМ. М.: Статистика, 1976. 144 с.*
24. *Атре Ш.* Структурный подход к организации баз данных. М.: Финансы и статистика, 1983. 317 с.
25. *Сорокин Ю. И., Моисеев В. С.* Методы и модели автоматизированного проектирования баз данных // *Прикладная информатика. М.: Финансы и статистика, 1983. Вып. 2. С. 170—183.*
26. *Ветозин В. П., Надеждин Ю. В., Потапов В. И., Кафаров В. В.* Использование СУБД «Квант-М» для построения банка данных САПР ХТП. М.: ЦНИИТЭнефтехим. 1984. С. 18—27.
27. *Фридлендлер Ф. Л., Савинков В. М.* Пакет прикладных программ СУБД

- НАБОБ // Алгоритмы и организация решения прикладных экономических задач. М.: Статистика, 1978. Вып. 12. с. 25—40.
28. *Evan B.* The industrial data bank: Utopia vs the real world // Phase Equilibria and Fluid Prop.: Chem. Ind. Estim. and Correl. Symp. Asilomar Conf., Grounds, Pacif. Grove, Cal., 1977. P. 537—539.
 29. *Викторов М. М.* Методы вычисления физико-химических величин и прикладные расчеты. Л.: Химия, 1977. 360 с.
 30. *Зайцев И. Д., Зозуля А. Ф., Асаев Г. Г.* Машинный расчет физико-химических параметров неорганических веществ. М.: Химия, 1976. 256 с.
 31. *Рид Р., Шервуд Т.* Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1971. 702 с.
 32. *Бретшнайдер С.* Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1966. 536 с.
 33. *Коган В. Б., Фридман В. М., Кафаров В. В.* Равновесие между жидкостью и паром. М.: Наука, 1966. 671 с.
 34. *Кафаров В. В., Ветозин В. П., Бояринов А. И.* и др. Информационно-поисковая система «Свойства». М.: НИИТЭХИМ, 1976. 70 с.
 35. *Прауэниц Дж.* и др. Машинный расчет парожидкостного равновесия многокомпонентных смесей. М.: Химия, 1971. 215 с.
 36. *Tassios D.* The number of roots in the NRTL and LEMF equations and the effect on their performance // Ind. and Eng. Chem. Process Des. and Develop. 1979. Vol. 18, N 1. P. 182—186.
 37. *Hecht G.* Probleme der Datenverarbeitung in der chemischen Thermodynamik // Chem. Techn. 1969. N 21. S. 265—267.
 38. *Ketehum R. G.* A time-saving method for calculating bubble and dew points // Chem. Eng. Sci. 1978. Vol. 33, N 9. P. 1285—1287.
 39. *Кафаров В. В., Ветозин В. П., Потанов В. И.* Декомпозиционный метод расчета технологических схем выделения целевых продуктов // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 1984. Т. 27, № 4. С. 470—474.

Глава 6

ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА СИСТЕМ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ

Вычислительные средства по сложности, технологии изготовления и возможностям подразделяются на ЭВМ общего назначения (универсальные), мини-ЭВМ, микроЭВМ, микропроцессоры.

Основными структурами технических средств САПР являются конфигурации на базе больших ЭВМ единой серии (ЕС ЭВМ) и на базе мини-ЭВМ (СМ ЭВМ). Системы проектирования на базе ЕС ЭВМ используются в основном в крупных научно-исследовательских и проектных институтах как в пакетном режиме, так и с развитой системой разделения времени. На базе мини-ЭВМ строятся автоматизированные рабочие места (АРМ), предназначенные для решения частных задач проектирования, обработки графической информации. Бурное развитие микроЭВМ способствует появлению персональных терминалов, которые, возможно, в будущем заменят АРМ на базе мини-ЭВМ.

Основу ЭВМ общего назначения составляют ЕС ЭВМ, изготовляемые и комплектуемые в рамках СЭВ. Их использование в САПР (как и в других областях применения) перспективно благодаря программной и аппаратной совместимости всех моделей, возможности агрегирования исходя из требований пользователя. ЕС ЭВМ составляют два подсемейства: ряда 1 и ряда 2. Первое подсемейство включает следующие модели: ЕС-1010, ЕС-1020, ЕС-1021, ЕС-1030, ЕС-1040, ЕС-1050 и дополнительно ЕС-1022, ЕС-1012, ЕС-1033, ЕС-1052.

В ЕС ЭВМ-2 (ряда 2), являющейся дальнейшим развитием ЕС ЭВМ-1, сохранены все достоинства предыдущей серии и, кроме того, она дополнена новыми функциональными свойствами. Это повышение производительности и общей эффективности системы, увеличение емкости оперативной памяти, повышение надежности системы, дальнейшее развитие программного обеспечения.

Важное отличие машин ряда 2 от машин ряда 1 состоит не только в улучшении параметров по быстродействию и объемам ОЗУ, но и в относительном удешевлении стоимости одной операции. Например, если взять за единицу отношение производительности к стоимости для машин ряда 1, то для машин ряда 2 этот коэффициент увеличен в два-три раза, а надежность этих моделей увеличена в два раза по сравнению с ЭВМ ряда 1. Это означает, что машины ряда 2 в четыре-пять раз эффективнее машин ряда 1, т. е. одинаковый объем вычислительной работы машинами ряда 2 выполняется в четыре-пять раз дешевле.

Машины ЕС ЭВМ ряда 2 сохраняют программную преемственность по отношению к ЭВМ ряда 1, но для эффективного использования новых возможностей, заложенных в архитектуру этих моделей, требуется внедрение новых операционных систем. В отличие от моделей ряда 1 во всех моделях ряда 2 предусмотрены аппаратные и программно-аппаратные средства объединения этих машин в многопроцессорные комплексы.

В машинах ряда 2 более развиты средства дистанционного доступа, или, как говорят, средства телеобработки. В частности, для обеспечения возможности динамического распределения памяти во всех машинах ряда 2 аппаратно реализованы механизмы виртуальной памяти. Совершенствование программного обеспечения уже сейчас позволяет практически снять ограничения по памяти для ЭВМ благодаря введению концепции виртуальной памяти. Существенно повышается и точность вычислений введенных операций с 16-байтовыми числами. Быстрое развитие программного обеспечения привело к тому, что на его создание идет примерно 90% всех трудовых затрат, связанных с созданием новых средств вычислительной техники.

Применение интегральных схем и в первую очередь устройств постоянной памяти и программируемых логических матриц привело к тому, что программы стало целесообразнее хранить не на

магнитных дисках или лентах, а реализовывать в интегральных схемах. Технические характеристики ЕС ЭВМ-2 приведены в табл. 6.1.

Таблица 6.1

Тип модели	Страна-разработчик	Производительность, тыс. операций/с	Объем оперативной памяти, кбайт	Количество и скорость мультиплексного канала, кбайт/с	Количество и скорость передачи данных, Мбайт/с	Электроника		
						100/И	100/16И	100/25
ЕС-1015	ВНР	19—21	256	8×20	8			
ЕС-1025	ЧССР	35—50	256	32×29	2×0,3			
ЕС-1035	СССР	140—160	1024	3×30	2×0,70			
ЕС-1045	СССР	880	1·10 ⁶	1×(12—40)	5×(0,5—1,0)			
ЕС-1055	ГДР	450	2·10 ⁶	2×40	4×1			
ЕС-1060	СССР	1000	8·10 ⁶	1×500	3×1,5			
ЕС-1065	СССР	5000	8·10 ⁶	4×700	5×2,5			

Дальнейшее развитие ЕС ЭВМ связано с развитием принципов организации ЭВМ четвертого поколения и направлено на удовлетворение требований перспективного использования вычислительных машин в многопроцессорных и многомашинных вычислительных комплексах и сетях ЭВМ при сохранении программной совместимости с ранними моделями.

Для ЭВМ четвертого поколения ставится задача не только повышения эффективности использования процессора и внешних устройств (снижение затрат машинного времени на трансляцию, сборку программ, редактирование), но и устранения «языкового барьера» между пользователем и ЭВМ за счет применения проблемно-ориентированных языков программирования.

Не так давно появились новые типы вычислительных средств, получившие название мини-ЭВМ. Среди них распространение получила система малых ЭВМ (СМ ЭВМ), которые по структурной организации подразделяются на два класса: с интерфейсом 2К (М-6000, М-6010, М-7000, М-60, СМ-1, СМ-2) и с интерфейсом «Общая шина» (М-400, СМ-3, СМ-4, Электроника-100/И, Электроника-100/16И, Электроника-100/25). В САПР наибольшее распространение получили ЭВМ второго класса как базовые для построения интерактивных АРМ проектировщика. Основные технические характеристики мини-ЭВМ приведены в табл. 6.2. Мини-ЭВМ нашли применение в самых различных областях благодаря компактности, разветвленной сети терминалов, простоте эксплуатации.

Однако в тех областях, где ЭВМ используется для выполнения фиксированных действий по установленным программам, предпочтительнее использование микроЭВМ, основу которых состав-

Таблица 6.2

Параметры	М-400	СМ-3	СМ-4	Электроника		
				100/И	100/16И	100/25
Длина слова (бит)	16	16	16	12	16	16
Емкость оперативной памяти, кбайт	64	128	256	64	32	256
Время выполнения операций, мкс						
типа сложения	5	5	3,9	2,5	5	1,4
типа умножения	38	40	35	30	42	35
Скорость передачи по каналу прямого доступа, кбит/с	400	400	600	400	400	700
Емкость						
магнитные диски, Мбит	32,5	32,5	32,5	30	30	30
магнитная лента, бит		10 ⁶ для всех типов				
Способ виртуальной памяти	Нет	Нет	Есть	Нет	Нет	Есть
Возможность объединения в многомашинные комплексы	Нет	Нет	Есть	Нет	Нет	Есть

ляет микропроцессор с высоким уровнем интеграции (большая интегральная схема — БИС). Это электронный блок, функции которого заданы программированием по принципу постоянной памяти. МикроЭВМ отличаются от мини-ЭВМ уровнем программного обеспечения, более низкой производительностью. В САПР микроЭВМ используются для управления устройствами отображения, ввода и вывода графической информации, т. е. используются в составе «интеллектуальных» терминалов. Технические характеристики отдельных микроЭВМ приведены в табл. 6.3.

Обычно микроЭВМ комплектуются периферийными устройствами типа дисплеев, графопостроителей, накопителями на магнитных гибких дисках, устройствами связи с объектом (УСО).

Микропроцессоры используются в виде отдельных встроенных блоков управления и технических средств САПР, таких, как графопостроители, устройства ввода и т. д. Развитие мини- и микроЭВМ открывает широкие возможности по созданию многопроцессорных вычислительных систем, позволяющих более рационально планировать выполнение отдельных подзадач в параллельном режиме работы, что позволяет решать сложные задачи в десятки раз быстрее, чем на мощных ЭВМ.

Все большее внимание уделяется созданию средств и методов, обеспечивающих удобные способы общения пользователя с ЭВМ. Ставится задача непосредственного доступа пользователя к ЭВМ через сети абонентских пунктов или терминалов. Пасущая потребность в таких устройствах очевидна.

Таблица 6.3

МикроЭВМ	Производительность, тыс. операций/с	Максимальный объем памяти, кбайт	Тип представления чисел и разрядность	Программное обеспечение
Электроника-60	250	56	Двоичный, 16-разрядный	Бейсик, ассемблер, ПЛОС, ФОБОС
ИЦ-3Д	100	64	То же	ПЛ/М, ассемблер, ПЛОС
ИЦ-5Т	400	64 + виртуальная память	*	ПЛ/М, ДОС, ассемблер
СМ/1800	100	64	*	Бейсик, ПЛ/М, ассемблер
С5-21	300	64	*	Бейсик, ПЛОС, ассемблер
Искра-1262	30	12	Десятичный, 13-разрядный	Бейсик с графическим операторами
Искра-226	10	64	То же	Бейсик

Применение ЭВМ для автоматизации проектно-конструкторских работ связано с обработкой графической информации на всех этапах автоматизированного проектирования — от ввода данных в графической форме до вывода результатов в виде чертежей, графиков, диаграмм и т. д. Поэтому создание методов автоматизации обработки графической информации имеет большое значение для успешного применения ЭВМ при автоматизации проектных работ. Основными задачами в этом направлении являются совершенствование и разработка существующих технических и программных средств в рамках, создаваемых САПР.

По выполняемым функциям технические средства (ТС) машинной графики можно разбить на группы: устройства ввода, устройства вывода, устройства ввода-вывода.

Автоматизация проектно-конструкторских и научно-исследовательских работ привела к объединению разных устройств в рабочее место оператора, связанное с ЭВМ и получившее название терминала. В его состав входит электрифицированная пишущая машинка для текстового общения с ЭВМ, дисплей для графического общения с ЭВМ, чертежный автомат для документирования промежуточных и окончательных результатов, устройство полуавтоматического или автоматического ввода графической информации, аппаратура дистанционной передачи данных и сопряжения с каналом ЭВМ, процессор (специализированную ЭВМ) для управления устойчивыми терминалами и первичной обработки информации.

Из используемых графических устройств наиболее распространены чертежные, которые работают либо автономно, либо совместно с ЭВМ. В гораздо меньшей степени используются дисплеи и устройства ввода.

Машинная графика развивается с началом широкой эксплуатации ЭВМ, но за последние годы в этой области достигнуты исключительно большие успехи, что по степени значительности ее сравнимой с электричеством. Человечество лишь начало привыкать к общению с вычислительными машинами посредством текстов, и широкое распространение машинной графики дало большие возможности для тесного взаимодействия между человеком и машиной.

Средство представления информации в системах машинной графики — графический дисплей, управляемых от ЭВМ. Наиболее распространены графические дисплеи на электроно-лучевых трубках (ЭЛТ) двух типов — запоминающих и с регенерацией. Экран запоминающей ЭЛТ покрыт слоем специального люминофора, фиксирующего изображение, «нарисованное» на нем электронным лучом при небольшом постоянном напряжении. Запоминающие ЭЛТ отличаются высоким разрешением и невысокими требованиями к объему памяти вычислительного оборудования. Однако специфика их работы не позволяет стирать с экрана отдельные линии. Для удаления линии или части изображения необходимо «стереть» изображение полностью и затем возобновить его без ненужного фрагмента. При использовании ЭЛТ с регенерацией изображение, нанесенное на экран электронным лучом, довольно быстро гаснет и его необходимо возобновлять (регенерировать) с частотой 30 Гц или чаще. Такой способ отображения информации более глубок, но требует большего объема памяти, чтобы «запомнить» изображение. Меньшее распространение получили плазменные дисплеи, которые представляют собой плоские панели из двух слоев стекла, пространство между которыми заполнено газом, например неоном. Между стеклами находится тонкая сетка электродов. Подача напряжения на пересечения электродов приводит к ионизации и свечению газа в данной зоне экрана.

По способу формирования изображения различают векторные и растровые дисплеи. В векторном дисплее изображение разбивается на отдельные линии и адресация осуществляется заданием координат конечных точек каждой линии. Отрезки окружности задаются центром и радиусом или координатами трех точек. В растровых дисплеях все поле экрана представляет собой сетку, каждый узел которой есть элемент изображения («пиксел»). Электронный луч пробегает все поле строки за строкой, и изменение его интенсивности вплоть до полного гашения позволяет построить полную картину с тенями и полутенями.

Примером растрового дисплея может служить бытовой ТВ-приемник. Основной недостаток растровых дисплеев по сравнению

с векторными — изломанность линий («эффект лестницы») из-за дискретности изображения. Цветные векторные дисплеи появились сравнительно недавно: до этого многоцветные изображения удавалось получать только на растровых дисплеях.

В 1980—1981 гг. были продемонстрированы два типа трехмерных дисплеев, с помощью которых можно создавать объемные изображения, которые с различных направлений видимы по-разному. В первом из них используется виниловое зеркало, которое вибрирует, меняя форму, с частотой 30 Гц. Изображение на экране Э.Т.У синхронизируется с формой зеркала и, отражаясь в нем, превращается в объемную картину. Во втором трехмерном дисплее, где носитель информации — вращающаяся панель светоизлучающих диодов, изображение осуществляется в соответствии с характером формируемого изображения и углом поворота панели.

Для обеспечения обратной связи между человеком-оператором и вычислительной машиной в дисплее имеются устройства ввода информации с рабочими органами в виде клавиатуры (алфавитно-цифровые и функциональные), управляемой сферы или ручки управления. Проворачивая сферу рукой или двигая ручкой, оператор перемещает на экране специальный символ-метку (или маркер), совмещая его с нужной точкой изображения. Более удобное средство ввода информации — световое перо, представляющее собой высокочувствительный приемник света в форме авторучки или карандаша, который соединяется проводом или световодом для передачи воспринятого с экрана светового сигнала. При использовании светового пера адресация элемента изображения производится синхронизацией световых импульсов. Специальное программное обеспечение для систем машинной графики дает возможность оператору воздействовать на изображение разнообразными способами: пропорционально увеличивать или уменьшать его, размножать, поворачивать, изменять проекцию, деформировать в необходимом направлении и т. д. Из базы данных могут вызываться готовые элементы изображения и символы.

Ввод графической информации в ЭВМ независимо от дисплея производится с использованием устройства оцифровки («дигитайзера» или «сколки»). Лист бумаги с изображением, которое требуется ввести в ЭВМ, закрепляют на панели из оргстекла, под которой проложена сетка тонких проводников. Обводя контуры изображения специальным «пером», оператор меняет емкость определенных участков электрической сетки, и в машину передаются координаты соответствующих узлов.

Используются и другие способы оцифровки: электроконтактный, электроакустический и т. д. Качество ввода изображения обычно контролируют с помощью небольшого экрана, на котором воспроизводятся обведенные контуры, полученные обратным преобразованием цифровых координат.

Для получения постоянных копий изображений с экрана дис-

Используются различного рода графопостроители, например планшетные или рулонные механические (в том числе многоцветные), а также разнообразные немеханические устройства вывода графической информации (электростатические, термографические и т. д.). Применяют устройства регистрации изображений на фотопленку, лазерные и ксерографические системы.

Помимо отдельных элементов, выпускаются комплексные системы машинной графики, в состав которых входят собственные мини-ЭВМ, алфавитно-цифровые и графические дисплеи, устройства сопряжения с центральной ЭВМ или информационно-вычислительной сетью, средства ввода и вывода графической информации и внешние накопители (на кассетах или гибких дисках). Такие универсальные системы или автоматизированные рабочие места операторов получили специальное название «торики» (turnkey), что означает полностью готовый и сданный в эксплуатацию объект. Они снабжаются полной совокупностью необходимого программного обеспечения.

Основными графическими устройствами, используемыми в САПР, являются графопостроители, разработанные в рамках серии ЕС ЭВМ.

Программное графическое обеспечение САПР состоит из следующих уровней: базисного, функциональных пакетов программы и прикладных графических программ.

Базисное программное обеспечение. Оно обычно состоит из нескольких основных подпрограмм и обеспечивает включение в систему графических устройств ввода-вывода, их функционирование и обмен графическими данными.

Оно достаточно универсально и реализует основные операции, которые позволяют получать чертежи, состоящие из наборов отрезков, прямых, дуг, символов (букв, цифр), а также осуществлять масштабирование и перемещение графических элементов. Однако его использование трудоемко для автоматического вычерчивания сложных чертежей из-за необходимости многократного использования этих программ в отдельности.

Базисное обеспечение для графопостроителей ЕС-7051, ЕС-7052, ЕС-7053 состоит из шести программ, которые позволяют задавать любую последовательность алфавитно-цифровых символов (специальных символов, меток), обрабатывать массив входных данных для вычерчивания осей с указанием масштаба и их названия, вычерчивать последовательности точек, соединяя их отрезками прямых, выводить собственно графические данные.

Функциональные пакеты программ. Они представляют собой набор графических подпрограмм, обращение к которым осуществляется в программах пользователя, в основном написанных на языке фортран.

Они обеспечивают черчение элементов различного рода: графиков, систем координат, диаграмм и т. д.

с векторными — изломанность линий («эффект лестницы») из-за дискретности изображения. Цветные векторные дисплеи появились сравнительно недавно: до этого многоцветные изображения удавалось получать только на растровых дисплеях.

В 1980—1981 гг. были продемонстрированы два типа трехмерных дисплеев, с помощью которых можно создавать объемные изображения, которые с различных направлений видимы по-разному. В первом из них используется вышловое зеркало, которое вибрирует, меняя форму, с частотой 30 Гц. Изображение на экране ЭЛТ синхронизируется с формой зеркала и, отражаясь в нем, превращается в объемную картину. Во втором трехмерном дисплее, где носитель информации — вращающаяся панель светонизлучающих диодов, изображение осуществляется в соответствии с характером формируемого изображения и углом поворота панели.

Для обеспечения обратной связи между человеком-оператором и вычислительной машиной в дисплее имеются устройства ввода информации с рабочими органами в виде клавиатуры (алфавитно-цифровые и функциональные), управляемой сферы или ручки управления. Проворачивая сферу рукой или двигая ручкой, оператор перемещает на экране специальный символ-метку (или маркер), совмещая его с нужной точкой изображения. Более удобное средство ввода информации — световое перо, представляющее собой высокочувствительный приемник света в форме авторучки или карандаша, который соединяется проводом или световодом для передачи воспринятого с экрана светового сигнала. При использовании светового пера адресация элемента изображения производится синхронизацией световых импульсов. Специальное программное обеспечение для систем машинной графики дает возможность оператору воздействовать на изображение разнообразными способами: пропорционально увеличивать или уменьшать его, размножать, поворачивать, изменять проекцию, деформировать в необходимом направлении и т. д. Из базы данных могут вызываться готовые элементы изображения и символы.

Ввод графической информации в ЭВМ назависимо от дисплея производится с использованием устройства оцифровки («дигитайзера» или «сколки»). Лист бумаги с изображением, которое требуется ввести в ЭВМ, закрепляют на панели из оргстекла, под которой проложена сетка тонких проводников. Обводя контуры изображения специальным «пером», оператор меняет емкость определенных участков электрической сетки, и в машину передаются координаты соответствующих узлов.

Используются и другие способы оцифровки: электроконтактный, электроакустический и т. д. Качество ввода изображения обычно контролируют с помощью небольшого экрана, на котором воспроизводятся обведенные контуры, полученные обратным преобразованием цифровых координат.

Для получения постоянных копий изображений с экрана дис-

плеев используются различного рода графопостроители, например планшетные или рулонные механические (в том числе многоцветные), а также разнообразные немеханические устройства вывода графической информации (электростатические, термографические и т. д.). Применяют устройства регистрации изображений на фотопленку, лазерные и ксерографические системы.

Помимо отдельных элементов, выпускаются комплексные системы машинной графики, в состав которых входят собственные мини-ЭВМ, алфавитно-цифровые и графические дисплеи, устройства сопряжения с центральной ЭВМ или информационно-вычислительной сетью, средства ввода и вывода графической информации и внешние накопители (на кассетах или гибких дисках). Такие универсальные системы или автоматизированные рабочие места операторов получили специальное название «торики» (turnkey), что означает полностью готовый и сданный в эксплуатацию объект. Они снабжаются полной совокупностью необходимого программного обеспечения.

Основными графическими устройствами, используемыми в САПР, являются графопостроители, разработанные в рамках серии ЕС ЭВМ.

Программное графическое обеспечение САПР состоит из следующих уровней: базисного, функциональных пакетов программы и прикладных графических программ.

Базисное программное обеспечение. Оно обычно состоит из нескольких основных подпрограмм и обеспечивает включение в систему графических устройств ввода-вывода, их функционирование и обмен графическими данными.

Оно достаточно универсально и реализует основные операции, которые позволяют получать чертежи, состоящие из наборов отрезков, прямых, дуг, символов (букв, цифр), а также осуществлять масштабирование и перемещение графических элементов. Однако его использование трудоемко для автоматического вычерчивания сложных чертежей из-за необходимости многократного использования этих программ в отдельности.

Базисное обеспечение для графопостроителей ЕС-7051, ЕС-7052, ЕС-7053 состоит из шести программ, которые позволяют создавать любую последовательность алфавитно-цифровых символов (специальных символов, меток), обрабатывать массив входных данных для вычерчивания осей с указанием масштаба и их названия, вычерчивать последовательности точек, соединяя их отрезками прямых, выводить собственно графические данные.

Функциональные пакеты программ. Они представляют собой набор графических подпрограмм, обращение к которым осуществляется в программах пользователя, в основном написанных на языке фортран.

Они обеспечивают черчение элементов различного рода: графиков, систем координат, диаграмм и т. д.

Представителями систем программирования графических устройств являются AVZET1, графтор, PAD-ES, графический пакет ES ЭВМ, GHOST, GSP.

Прикладные графические программы. Они ориентированы на вычерчивание определенных разновидностей деталей и узлов различного рода конструкций (проектирование операционной технологии, режущего инструмента, приспособлений и т. д.) Они содержат средства формирования чертежа со всеми условиями и обеспечивают выполнение отдельных функций по его построению.

Так, например, ФАП-КФ (формализованный аппарат геометрического моделирования на основе компилятора с языка фортран) относится к программным средствам геометрического моделирования и автоматизации игр и представляет собой пакет программ на языке фортран. Пакет организован так, что по отношению к пользователю ФАП-КФ выступает в виде самостоятельного геометрически-ориентированного языка, являющегося расширением языка фортран геометрическими переменными (линиями, поверхностями первого и второго порядка) и операциями. Он может быть использован в качестве языка программирования при создании геометрических блоков систем автоматического проектирования и технологического проектирования, при разработке алгоритмов и программ решения сложных геометрических задач, а также в ряде других задач, которые могут быть решены геометрическим моделированием.

Для решения этих задач в ФАП-КФ имеется более 200 геометрических операторов для определения геометрических объектов для осуществления различных действий над ними — перенос вращения; объединения областей, эквидистантных и лекальных кривых; построения линий пересечения поверхностей, сечения проекций; аппроксимации кривых. ФАП-КФ содержит также средства для анализа геометрических объектов и их взаимного расположения. Имеются операторы вывода графической информации на устройствах отображения.

Базовый проблемно-ориентированный язык для описания графической информации ОГРА-1 предназначен для описания графических конструкторских документов и операций их формирования в САПР.

Программы ОГРА-1 стыкуются с программами на языке фортран, ПЛ-1, ассемблер.

В языке ОГРА-1 выделен следующий набор графических объектов: точка, прямая, отрезок, кривая второго порядка (в частном случае окружность) или дуга кривой, лекальная кривая, заданная точечным базисом, области, покрываемые штриховкой, алфавитно-цифровые и специальные символы, типовые изображения графического конструкторского документа, графические объекты, являющиеся комбинацией любых перечисленных объектов, геометрические образы изделий.

Распространенным классом графических объектов являются типовые графические изображения, унифицированные по форме и расположению линий и символов, фрагменты графического конструкторского документа.

Таким образом, имеется достаточно развитое программное обеспечение средств машинной графики, которое можно применять в САПР. При использовании существующих программ постоянные графические изображения целесообразно применять на низких уровнях разрабатываемого программного обеспечения. Это позволяет избавиться от лишних затрат машинного времени. Постоянные графические изображения перерабатываются соответствующим образом, например для масштабирования. Описания графических изображений можно хранить в виде библиотеки типовых изображений. Программы формирования типовых изображений включаются в программу автоматического вычерчивания, и после их выполнения по заданным фактическим параметрам можно получать конкретное изображение. Эти программы могут быть написаны на рассмотренных выше графических языках с использованием алгоритмических языков высокого уровня, позволяющих максимально упростить подготовку программ.

6.1. Архитектура технических средств

Современные вычислительные средства представляют собой программно-технические комплексы, комплектуемые исходя из класса решаемых задач. Логическая структура ЭВМ позволяет изменять набор как технических, так и программных средств по мере накопления опыта работы. Изменение конфигурации ЭВМ обеспечивается стандартными устройствами обмена — каналами. Функциональная связь устройств ЭВМ представлена на рис. 6.1. На каналах процессора через стандартную схему сопряжения (интерфейс ввода-вывода) подсоединяются внешние устройства. Взаимодействие всего комплекса обеспечивается устройством управления, расположенным в процессоре.

Центральной частью ЭВМ является процессор, предназначенный для управления последовательностью выполнения команд, организации взаимодействия и функционирования системы. Независимо от модели ЭВМ процессор выполняет одни и те же логические функции. Он обеспечивает адресацию основной памяти, хранение и выдачу информации и программы, инициализацию работы каналов, выполнение арифметических и логических операций. Производительность вычислительной системы характеризуется главным образом скоростью выполнения операций процессором, т. е. его быстродействием. По скорости работы процессор превосходит все остальные устройства. Поэтому повышение производительности возможно за счет снижения времени его простоя в период работы (загрузки) медленных устройств.

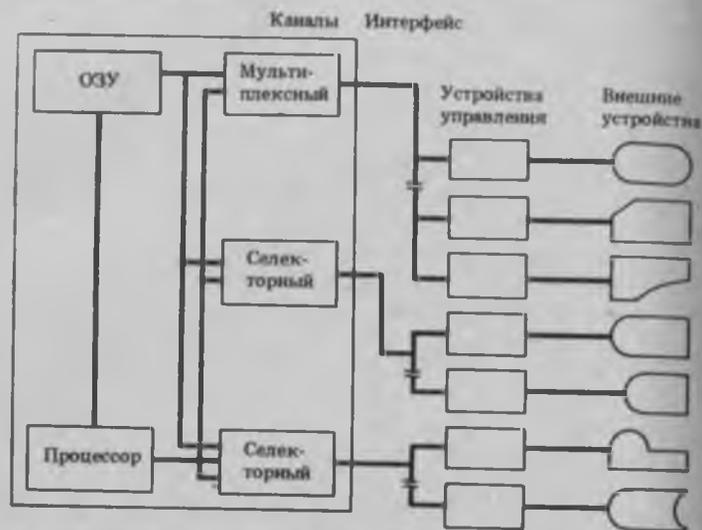


Рис. 6.1. Конфигурация ЕС ЭВМ

Выполнение операций производится с информацией, расположенной в оперативной памяти. Ее объем наряду с быстродействием является важнейшей характеристикой мощности ЭВМ. В зависимости от модели емкость памяти изменяется в широких пределах: от десятков килобайт (1 кбайт = 1024 байт) до нескольких мегабайт.

Наряду с оперативной памятью для хранения огромных массивов информации используются внешние запоминающие устройства, наиболее распространенными из которых являются накопители на магнитных дисках (НМД) или гибких магнитных дисках (НМГД) и накопители на магнитных лентах (НМЛ). Емкость этих накопителей практически неограничена не только благодаря возможности подключения нескольких накопителей емкостью в несколько десятков и сотен мегабайт, но и благодаря возможности смены ленты или пакета дисков.

К другим внешним устройствам ЭВМ относятся устройства ввода-вывода типа дисплеев, графопостроителей, печатающих устройств и т. д. Обеспечение взаимодействия процессора с внешними устройствами возложено на каналы ввода-вывода. Внешние устройства в значительной степени автономны, они не только выполняют непосредственно операции по переработке информации, но и обеспечивают правильность их выполнения. Эти функции выполняются с помощью специальных канальных программ для каждого внешнего устройства. По этим программам организуется взаимодействие внешнего устройства с процессором и выполнение собственно функций устройства.

Различают два типа каналов — мультиплексный и селекторный, отличающиеся возможностью подключения внешних устройств, различных по своим функциям и быстродействию. Мультиплексный канал обеспечивает работу процессора с относительно медленными устройствами, такими как ввода-вывода перфокарт, печати. Этот канал имеет отдельные подканалы, к которым могут подключаться другие внешние устройства, работающие каждые в отдельности или в мультиплексном режиме (через определенные интервалы времени). Селекторный канал обеспечивает работу с относительно быстрыми внешними устройствами (например, используемыми магнитные диски, ленты и др.). Он имеет один подканал и может работать только в монопольном режиме, т. е. только с одним устройством.

Автоматизированное рабочее место. Широкое распространение получают специализированные вычислительные комплексы на базе мини-ЭВМ, к которым относятся и диалоговые графические системы (АРМ), предназначенные для выполнения операций, связанных с вводом-выводом, редактированием графической и текстовой информации. Разработаны и серийно выпускаются комп-

Таблица 6.4

Тип устройства	АРМ-Р	АРМ-М	Кулон	АРМ-С
Устройство ввода с перфокарт	АП-6100	АП-6100		
Накопитель на магнитных лентах	АП-5080	АП-5080	ИЗОТ-5003	НМЛ-67
Графический дисплей	ЭПГ-СМ (ЭПГ-400)	УПГИ	ЗЭЛТ-15ИГ	УГД-43-1
Графопостроитель ручной	ЕС-7252		ЭМ-721	
Графопостроитель планшетный		ЕС-7251		ЭМ-722
Кодировщик графической информации	ЭМ-709	ПКГИ-0	ЭМ-719	ЭМ-709
Алфавитно-цифровой дисплей	ВТ-340, ВТА-2002	ВТ-340, ВТА-2002	15ИЭ-002	ВТ-340
Электронизирующая машина для ввода-вывода	Консул-260	Консул-260	Консул-260	Консул-254
Устройство печати	ДМ-180	ДМ-180, ДАРУ	ДМ-180	ДМ-180
Микрофильмограф			Карат	
Накопитель на магнитных дисках	ИЗОТ-1370	ИЗОТ-1370	ИЗОТ-1370	ИЗОТ-1370
Банков мини-ЭВМ	СМ-3, СМ-4	СМ-3, СМ-4	Электроника-100/25	Электроника-100/И

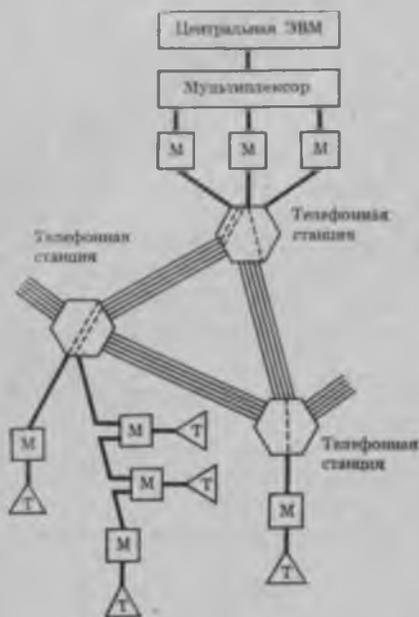


Рис. 6.2. Структура терминального комплекса

лексы технических и программных средств, такие, как АРМ-Р (проектирование в радиоэлектронике), АРМ-М (проектирование в машиностроении), АРМ-С (проектирование в строительстве), Кулон (проектирование БИС) и ряд других. Ядром комплекса является мини-ЭВМ типа СМ-3, СМ-4, Электроника-100/И. Процессор мини-ЭВМ связан магистралью обмена как с периферийным оборудованием, так и с процессором большой ЭВМ. Специализация комплексов в значительной степени определяется прикладным математическим обеспечением, ориентированным на выполнение расчетов именно в данной области. Что касается системного математического обеспечения, то оно практически взаимозаменяемо. Технические средства комплексов АРМ приведены в табл. 6.4 [1—3].

Многомашинные ассоциации. Мировая практика использования ЭВМ заключается в создании многомашинных ассоциаций с развитой системой коммуникаций, включая спутниковую связь. Эта тенденция сохраняется по мере появления все новых вычислительных средств и обусловлена тем, чтобы более эффективно использовать как мощность ЭВМ, так и накопленное прикладное математическое обеспечение. Существует три типа машинных ассоциаций: вычислительные комплексы, терминальные комплексы и вычислительные сети [4].

В вычислительных комплексах все входящие в них ЭВМ выполняют единый информационный процесс. Поэтому они, по существу, являются большими вычислительными машинами.

В терминальном комплексе объединяются аппаратные и программные средства, предназначенные для обеспечения взаимодействия пользователя и ЭВМ. Терминальный комплекс (рис. 6.2) состоит из центральной ЭВМ, мультиплексора, модемов (М), каналов связей и терминалов (Т). Мультиплексор выполняет функции сопряжения канала ЭВМ с аппаратурой передачи данных. Мультиплексоры и терминалы взаимодействуют с каналами связи (например, телефонной сетью) через специальные

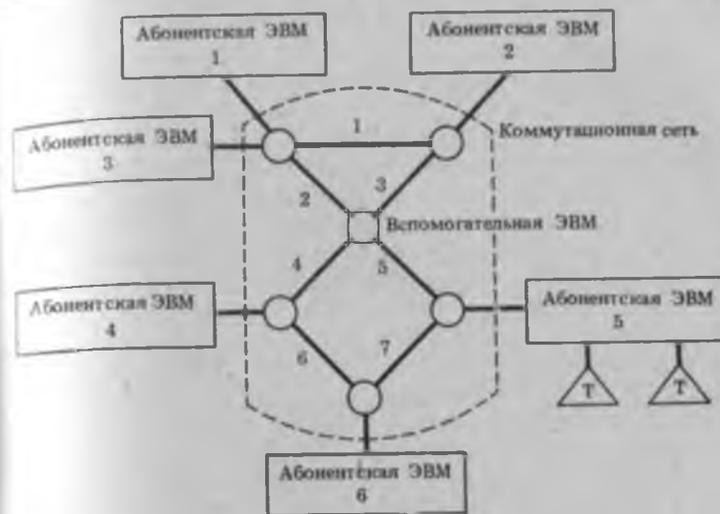


Рис. 6.3. Структура вычислительной сети

преобразователи, называемые модемами. Они преобразуют дискретную информацию ЭВМ в аналоговую (непрерывную) и наоборот. В одной вычислительной машине может быть подключено несколько терминальных комплексов, в том числе другая ЭВМ, эмулируемая под терминал. Такие машины являются спутниковыми. Они могут выполнять, например, предварительную обработку данных и передавать центральной ЭВМ. Под каналом связи можно понимать любой способ передачи информации на расстояние, в простейшем случае телефонную линию. Терминальный комплекс позволяет резко повысить эффективность обработки информации, поскольку расширяет круг пользователя ЭВМ и обеспечивает их непосредственный доступ к программному набору. Однако по мере увеличения мощности ЭВМ и протяженности линий связи более эффективными становятся вычислительные сети.

Вычислительные сети (рис. 6.3) не только качественно, но и количественно отличаются от терминальных комплексов, поскольку их определяют следующие основные характеристики: большое число взаимодействующих друг с другом ЭВМ, чрезвычайно большие вычислительные мощности, надежная и гибкая связь пользователя с мощностями ЭВМ, легкость расширения мощности сети. Вычислительная сеть состоит из абонентских вычислительных машин и связывающей их коммуникационной сети. Коммуникационная сеть образуется множеством коммуникационных ЭВМ и физическими каналами связи. Благодаря этому пользователь с терминала любой абонентской ЭВМ имеет доступ к программным и техническим средствам других ЭВМ, причем он может

связываться с ними не единственным способом, что только повышает надежности сети.

В общем случае преимущества создания и эксплуатации сетей можно сформулировать следующим образом: 1) более рациональное использование мощной вычислительной техники; 2) равнодоступность для всех пользователей (хотя и рассредоточенных) программных средств, реально функционирующих на данный момент времени; возможность быстрого аккумуляирования новых методов и систем, разработанных организациями как данной, так и смежных отраслей; 3) естественный отбор лучших, с точки зрения пользователей, систем или программ и последующая их концентрация; 4) появление возможности использования систем, в наибольшей степени отвечающих требованиям пользователя [5].

По способу работы вычислительные сети подразделяются на три класса: сети коммуникации каналов, сообщений и пакетов [4]. Различие между ними заключается в способах установления связи между абонентом и другой ЭВМ. В первом случае передача информации начинается после установления связи (канала) на всем протяжении коммуникационной сети между пользователем и ЭВМ. Эта связь должна оставаться неизменной в течение всего периода сеанса передачи информации. Во втором случае передача информации производится после освобождения одного из магистральных каналов, позволяющего приблизить пользователя к абонентской ЭВМ. Здесь коммутационные машины выполняют роль промежуточного запоминающего устройства передаваемой информации до освобождения следующего канала. При коммутации пакетов передаваемой информации длинные сообщения перед передачей их по коммутационной сети разбиваются на короткие пакеты, которые в местах назначения вновь собираются в сообщения. Благодаря пакетированию снижаются требования по памяти к коммуникационной ЭВМ и ускоряется их передача к месту назначения. Сети коммуникации каналов отличаются высокой надежностью и быстродействием. В настоящее время известен целый ряд крупных вычислительных сетей, например АРА (университеты и исследовательские организации США, Норвегии, Англии и Гавайских островов), EIN (исследовательские центры Западной Европы) и др. [6, 7].

6.2. Системное математическое обеспечение

Обеспечение возможности автоматизированного выполнения всех необходимых при проектировании расчетно-конструкторских, чертежно-графических и других работ возложено на программное обеспечение. По назначению программное обеспечение САПР подразделяется на системное и прикладное. На первом возлагаются функции организатора вычислительного процесса, а второе определяет «интеллект» САПР.

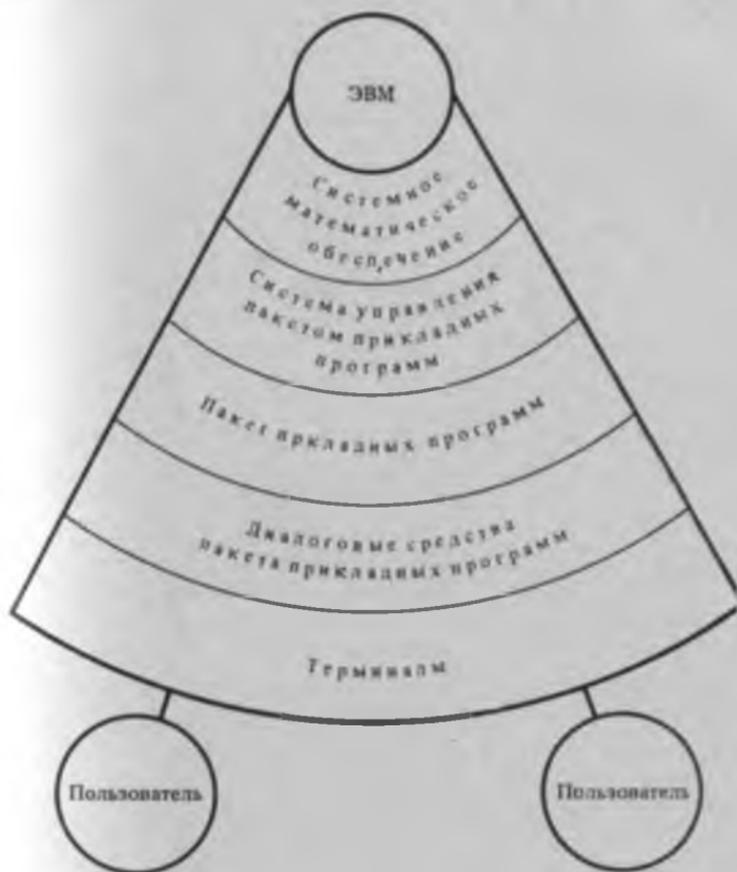


Рис. 6.4. Схема взаимодействия пользователя с ЭВМ

Основу системного программного обеспечения САПР составляют операционные системы ЭВМ и системы программирования для алгоритмических языков, используемых при создании и эксплуатации САПР. Оно поставляется вместе с ЭВМ как ядро технического обеспечения САПР, и пользователю нет необходимости в его разработке, необходимо лишь выбрать нужные компоненты и построить некоторую конфигурацию их. Генерация системного обеспечения осуществляется операционными системами ЕС ЭВМ и СМ ЭВМ.

Прикладное математическое обеспечение САПР определяет возможности системы по решению задач проектирования. Оно обычно разрабатывается применительно к конкретной области приложения в виде отдельных программ и ППП простой или сложной структуры (с собственной управляющей программой и средствами ведения диалога). Процесс взаимодействия пользователя

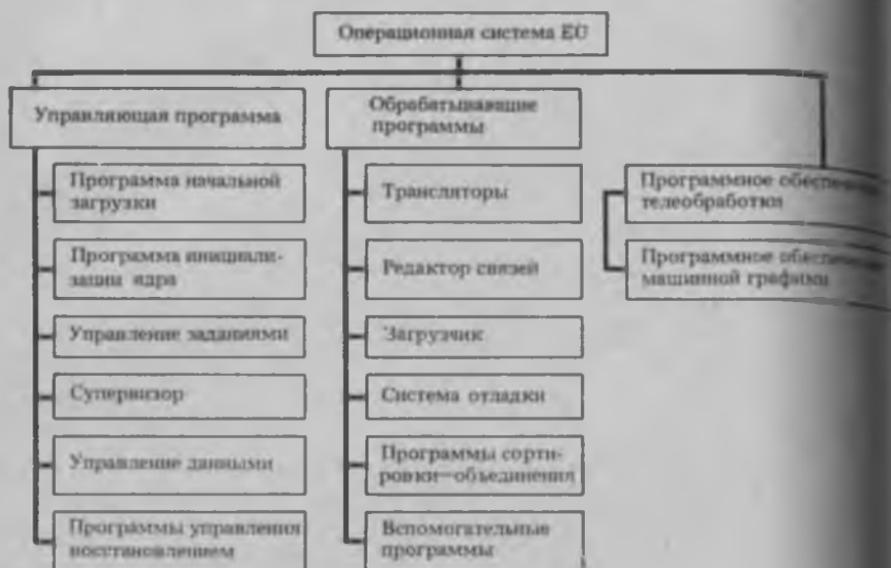


Рис. 6.5. Состав ОС ЕС

и ЭВМ представлен на рис. 6.4. При правильной организации вычислительного процесса (исправности оборудования, отсутствии ошибок в программах) системное математическое обеспечение по желанию пользователя позволяет проводить расчеты в автоматическом режиме, а при наличии диалоговых средств пользователь на любом их этапов может вмешиваться для внесения изменений или уточнения отдельных моментов.

Основу системного математического обеспечения составляет операционная система (ОС ЕС или ОС СМ). Для различных моделей ЭВМ разработано несколько разновидностей ОС. В наибольшей степени для решения задач САПР приспособлены ОС с разделением времени. Состав операционной системы ЕС ЭВМ представлен на рис. 6.5. В зависимости от режима работы можно выделить три уровня ОС: для пакетной обработки заданий, для пакетной обработки с мультипрограммированием, для работы в режиме разделения времени.

При пакетной обработке на входе вычислительной системы имеется пакет (пабор) заданий, последовательно выполняемых ЭВМ. Каждое задание может использовать все ресурсы системы за исключением некоторого объема оперативной памяти, постоянно занимаемой резидентной частью ОС. Пакетный режим работы позволяет исключить простой процессора за счет отстранения пользователя от ЭВМ (задания выполняются автоматически по управляющим операторам ОС) и частичного совмещения операций ввода-вывода и работы процессора. Однако

в силу ограниченного доступа к ЭВМ, многократности коррекции программы и большого числа выводов на этапе отладки программы затраты времени на решение задачи могут быть значительными, тем более пользователь не имеет возможности вносить оперативно изменения в программу.

Повышения эффективности использования вычислительной системы можно достигнуть, во-первых, за счет сокращения времени простоя процессора и, во-вторых, за счет сокращения времени ожидания решения в режиме пакетной обработки. Классическим примером повышения производительности ЭВМ является многопрограммный режим, или мультипрограммирование. Идея этого метода состоит в том, что ЭВМ настраивается на одновременное выполнение ряда задач, каждая из которых занимает часть оперативной памяти. Поскольку большинство внешних устройств может работать в автономном режиме после загрузки соответствующего канала, то совмещением работы внешних устройств и процессора можно достигнуть максимальной загрузки последнего. Как только одна из программ приостанавливается для выполнения, например, операции ввод-вывода, процессор перекладывается на выполнение другой программы, тем самым исключается время его ожидания. Разделам памяти присваиваются уровни приоритетности, которые и определяют последовательность переключения программ. Этот режим не предполагает непосредственного доступа пользователя к ЭВМ, так как в каждом разделе памяти производится пакетная обработка программ. Однако за счет лучшего использования оборудования время ожидания решения обычно сокращается по сравнению с однопрограммным режимом. Разновидностью режима мультипрограммирования является параллельная обработка, идея которой состоит в том, что переход от одной программы к другой производится в результате естественного прерывания (ожидания ввода-вывода) и вынужденного переключения через короткие промежутки времени, сравнимые со скоростью работы процессора. При параллельной обработке программы выполняются по очереди в короткие промежутки времени и создается впечатление их одновременного выполнения, тем более что результаты расчета выдаются пользователю по мере завершения каждой из них.

Более развитой формой многопрограммной работы является разделение времени. Идея этого режима работы состоит в том, что ресурсы ЭВМ предоставляются большому числу одновременно работающих пользователей благодаря наличию сети терминалов. В этом случае совмещаются возможности мультипрограммирования и параллельной обработки, а также добавляется непосредственный доступ пользователей к ресурсам ЭВМ в работе в реальном масштабе времени. Разделение времени становится основным режимом эксплуатации вычислительных систем и в своем совершенствовании затрагивает вопросы разработ-

ки не только специального математического обеспечения (ОС, распределение времени), но и прикладного (обслуживания терминалов, обеспечения универсальности прикладных модулей).

Управляющая программа. Различные компоненты управляющей программы (см. рис. 6.5) выполняют функции подготовки вычислительной системы к работе и выполнение этих работ в автоматическом режиме. После выполнения программы начальной загрузки ядро супервизора находится в оперативной памяти и начи-

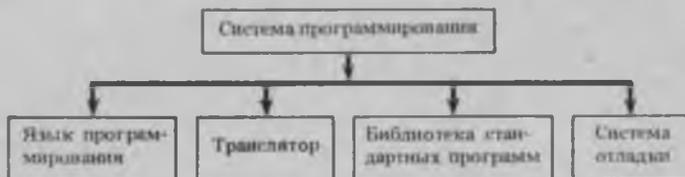


Рис. 6.6. Система программирования

нается подготовка и выполнение вычислительного процесса. Подготовка заключается в установлении конкретной конфигурации ЭВМ (устанавливается список устройств, отводимых для выполнения данного задания), вводе задания и иницировании работы. В процессе выполнения задания обеспечивается хранение, поиск и обслуживание данных. Управляющая программа постоянно «следит» за прохождением задания, обеспечивая вызов в оперативную память необходимых компонент ОС. При необходимости оператор может вмешаться в этот процесс через пульт (дисплей).

Обрабатывающие программы. Эти программы составляют комплекс средств, обеспечивающих составление и отладку программ пользователя, т. е. систему программирования (рис. 6.6). Сюда входят языки программирования, трансляторы, библиотеки стандартных программ и средства отладки.

Языки программирования являются одним из основных инструментов, которые предоставляют пользователю возможность использовать большинство других вычислительных инструментов, таких, как язык управления, графические устройства, информационные структуры. По мере совершенствования технических и вычислительных средств соответствующим образом совершенствуются и языки программирования с тем, чтобы реализовать эти достижения.

В настоящее время насчитывается несколько сотен языков программирования и число их растет по мере появления новых вычислительных средств и систем программирования. Все это разнообразие языков удобно классифицировать по степени зависимости от ЭВМ (табл. 6.5). Как следует из таблицы, все языки делятся на машинно-зависимые и машинно-независимые. К первым относятся языки, в большей (мнемокоды) или меньшей степени

Таблица 6.5

Язык программирования	Тип транслятора
Машинно-зависимый система команд машинно-ориентирован- ный мнемокод макроязык	Без транслятора То же Ассемблер Макроассемблер
Процедурно-ориентированный Проблемно-ориентированный	Компилятор Генератор

(макроязыки) связанные с машинными, т. е. использующие систему команд ЭВМ. Наиболее распространенным из этой группы является язык ассемблер, который используется в основном в качестве языка системного программирования. Он позволяет получить высококачественные по быстродействию и используемой памяти программы, однако труден в освоении.

Процедурно-ориентированные языки являются основными языками описания алгоритмов и имеются в математическом обеспечении всех современных ЭВМ. Сюда относятся такие языки, как бейсик, фортран, алгол, кобол, ПЛ-1. Будучи почти независимыми от конкретной вычислительной машины, они приближаются по синтаксису к естественным языкам.

Наличие нескольких языков в ОС обусловлено рядом причин. Во-первых, каждый из них имеет основную область применения, где он наиболее эффективен. Во-вторых, хронологически языки появлялись в различное время, каждый как более совершенный. Естественно, среди потребителей они находили своих приверженцев и использовались по мере освоения все шире и шире при разработке ППП. Наконец, при появлении более совершенного языка программирования перевод имеющихся программ на него связан со значительными затратами труда высокой квалификации. Несмотря на ряд недостатков, фортран имеет наибольшее распространение, хотя современные языки высокого уровня позволяют записывать алгоритмы более естественным путем. Среди языков высокого уровня при разработке САПР на ЕС ЭВМ широко используется ПЛ-1, обладающий рядом преимуществ перед другими языками как по синтаксическим средствам, так и по возможностям переработки больших объемов информации. Однако для мини- и микроЭВМ этот язык, за редким исключением, не реализован, и в качестве основного языка используется фортран.

САПР предполагают использование двух языков: языка управления, с помощью которого пользователь управляет работой

ки не только специального математического обеспечения (ОС, разделение времени), но и прикладного (обслуживания терминалов, обеспечения универсальности прикладных модулей).

Управляющая программа. Различные компоненты управляющей программы (см. рис. 6.5) выполняют функции подготовки вычислительной системы к работе и выполнение этих работ в автоматическом режиме. После выполнения программы начальной загрузки ядро супервизора находится в оперативной памяти и начи-

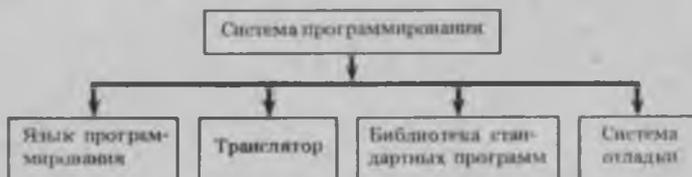


Рис. 6.6. Система программирования

нается подготовка и выполнение вычислительного процесса. Подготовка заключается в установлении конкретной конфигурации ЭВМ (устанавливается список устройств, отводимых для выполнения данного задания), вводе задания и иницировании работы. В процессе выполнения задания обеспечивается хранение, поиск и обслуживание данных. Управляющая программа постоянно «следит» за прохождением задания, обеспечивая вызов в оперативную память необходимых компонент ОС. При необходимости оператор может вмешаться в этот процесс через пульт (дисплей).

Обрабатывающие программы. Эти программы составляют комплекс средств, обеспечивающих составление и отладку программ пользователя, т. е. систему программирования (рис. 6.6). Сюда входят языки программирования, трансляторы, библиотеки стандартных программ и средства отладки.

Языки программирования являются одним из основных инструментов, которые предоставляют пользователю возможность использовать большинство других вычислительных инструментов, таких, как язык управления, графические устройства, информационные структуры. По мере совершенствования технических и вычислительных средств соответствующим образом совершенствуются и языки программирования с тем, чтобы реализовать эти достижения.

В настоящее время насчитывается несколько сотен языков программирования и число их растет по мере появления новых вычислительных средств и систем программирования. Все это разнообразие языков удобно классифицировать по степени зависимости от ЭВМ (табл. 6.5). Как следует из таблицы, все языки делятся на машинно-зависимые и машинно-независимые. К первым относятся языки, в большей (мнемокоды) или меньшей степени

Таблица 6.5

Язык программирования	Тип транслятора
Машинно-зависимый система команд машинно-ориентирован- ный мнемокод макроязык	Без транслятора То же Ассемблер Макроассемблер
Процедурно-ориентированный	Компилятор
Проблемно-ориентированный	Генератор

(макроязыки) связанные с машинными, т. е. использующие систему команд ЭВМ. Наиболее распространенным из этой группы является язык ассемблер, который используется в основном в качестве языка системного программирования. Он позволяет получать высококачественные по быстродействию и используемой памяти программы, однако труден в освоении.

Процедурно-ориентированные языки являются основными языками описания алгоритмов и имеются в математическом обеспечении всех современных ЭВМ. Сюда относятся такие языки, как бейсик, фортран, алгол, кобол, ПЛ-1. Будучи почти независимыми от конкретной вычислительной машины, они приближаются по синтаксису к естественным языкам.

Наличие нескольких языков в ОС обусловлено рядом причин. Во-первых, каждый из них имеет основную область применения, где он наиболее эффективен. Во-вторых, хронологически языки появлялись в различное время, каждый как более совершенный. Естественно, среди потребителей они находили своих приверженцев и использовались по мере освоения все шире и шире при разработке ППП. Наконец, при появлении более совершенного языка программирования перевод имеющихся программ на него связан со значительными затратами труда высокой квалификации. Несмотря на ряд недостатков, фортран имеет наибольшее распространение, хотя современные языки высокого уровня позволяют записывать алгоритмы более естественным путем. Среди языков высокого уровня при разработке САПР на ЕС ЭВМ широко используется ПЛ-1, обладающий рядом преимуществ перед другими языками как по синтаксическим средствам, так и по возможностям переработки больших объемов информации. Однако для мини- и микроЭВМ этот язык, за редким исключением, не реализован, и в качестве основного языка используется фортран.

САПР предполагают использование двух языков: языка управления, с помощью которого пользователь управляет работой

программ, и языка программирования. Язык управления наиболее очевиден в интерактивных системах, при его использовании пользователь выражает свою половину диалога с ЭВМ. Этот язык особенно важен для интерактивных графических систем. Язык управления большей частью специализированные и относятся к проблемно-ориентированным. Разработка и применение такого языка предполагает наличие обширного ППП или моделирующих систем. В этом случае от пользователя не требуется глубокого знания вычислительной техники и языков программирования, на которых реализована система. Пользователь является специалистом в области решаемых задач, и его функции состоят в правильной формулировке задачи и доведении ее до системы.

Основой для разработки процедурно-ориентированного языка служит какой-либо язык программирования. Это может быть машинно-зависимый или процедурно-ориентированный. Обычно разрабатывается на основе того языка, на котором реализована система. Этим достигается его независимость от ЭВМ и простота усовершенствования на любом уровне.

Транслятор в системе программирования выполняет роль посредника между входным языком (обычно процедурно-ориентированным) и выходным (машинным), преобразуя символическую запись программы в последовательность команд ЭВМ. От совершенства транслятора зависят такие показатели программы, как быстродействие, компактность, оптимальность выполнения вычислений с точки зрения накопления погрешностей.

Обязательным элементом системы программирования является библиотека стандартных программ. Она представляет собой пакет программ наиболее широко используемых методов решения, например задач вычислительной математики. Библиотека доступна всем пользователям системы и широко используется при составлении прикладного математического обеспечения.

Пользователь, разрабатывающий программу, большую часть времени тратит на ее отладку и выявление ошибок. В целях снижения затрат времени на отладку в системе программирования имеются средства диагностики ошибок, выявленных при трансляции, а также некоторых ошибок при выполнении программы (например, деления на нуль, заикливания отдельных частей программы и т. д.). Комплекс программ диагностики составляет систему отладки.

Разработка САПР в большей степени зависит от наличия развитых ОС. Это прежде всего связано с необходимостью взаимодействия пользователя с САПР. Взаимодействие обусловлено итерационной природой проектирования, наличием итерационной «контура» включающего пользователя и ЭВМ. Пользователь задает параметры для расчета и на основе полученных результатов вносит изменения. Этот процесс будет более эффективным при

мичи взаимодействующих ОС. Требование практики решения задач проектирования находит отражение в постоянном совершенствовании ОС, наделении их качествами, облегчающими взаимодействие пользователя — неспециалиста в области вычислительной техники с САПР. К таким свойствам ОС можно отнести удобство организации больших информационных систем (файлов), совершенство и простоту организации операций ввода-вывода числовой и графической информации, надежность операционной системы, оперативность взаимодействия системы пользователь—САПР, совместимость пакетной обработки заданий и в режиме интерактивного взаимодействия, развитую систему отладки и редактирования. Все большее применение в САПР находят мини-ЭВМ, хотя они имеют существенный недостаток, обусловленный слабостью ОС. Причина этого состоит в стремлении производителей ЭВМ создавать ОС, ориентированные на малые объемы памяти.

Языки обработки графической информации в САПР развиваются в основном по двум направлениям: на базе алгоритмических языков типа фортран, ПЛ-1, алгол с использованием механизма подпрограмм для вывода заданных графических изображений, состоящих из таких элементов, как точка, прямая, дуга, окружность, текст и т. д.; и путем расширения алгоритмических языков добавлением новых синтаксических элементов для описания графической информации компактным образом. Применение подобных языков неудобно в том смысле, что для каждого конкретного документа необходимо составлять новые программы, что требует высокой квалификации в области программирования. Более рациональным является направление по созданию проблемно-ориентированных графических языков для описания объектов различной геометрии: объектов ортогональной геометрии в двухмерном и трехмерном пространстве (проектирование зданий и элементов зданий, компоновка и размещение оборудования); объектов, ограниченных гладкими поверхностями второго и большего порядка; объектов, получаемых в технологии резания (например, машиностроительных конструкций) [8—10].

Для построения таких языков используются следующие подходы: восстановление геометрического образца из двухмерных геометрических изображений — проекций объекта, перемещение двухмерного объекта (образующей) по некоторой траектории и использование объемных базовых элементов формы. В первом случае в памяти ЭВМ имеются все характерные точки проекции чертежа детали и характеристики связывающих их элементов. Эти данные используются для восстановления структуры объекта в трехмерном пространстве. Программное обеспечение строится на основе графоаналитических методов. Во втором — для восстановления геометрии объекта необходимо иметь образующую тела вращения и закон ее перемещения. В третьем случае образ объекта

программ, и языка программирования. Язык управления наиболее очевиден в интерактивных системах, при его использовании пользователь выражает свою половину диалога с ЭВМ. Этот язык особенно важен для интерактивных графических систем. Язык управления большей частью специализированный и относится к проблемно-ориентированным. Разработка и применение такого языка предполагает наличие обширного ППП или моделирующей системы. В этом случае от пользователя не требуется глубокого знания вычислительной техники и языков программирования, на которых реализована система. Пользователь является специалистом в области решаемых задач, и его функции состоят в правильной формулировке задачи и доведении ее до системы.

Основой для разработки процедурно-ориентированного языка служит какой-либо язык программирования. Это может быть машинно-зависимый или процедурно-ориентированный. Обычно разрабатывается на основе того языка, на котором реализована система. Этим достигается его независимость от ЭВМ и простота усовершенствования на любом уровне.

Транслятор в системе программирования выполняет роль посредника между входным языком (обычно процедурно-ориентированным) и выходным (машинным), преобразуя символическую запись программы в последовательность команд ЭВМ. От совершенства транслятора зависят такие показатели программы, как быстродействие, компактность, оптимальность выполнения вычислений с точки зрения накопления погрешностей.

Обязательным элементом системы программирования является библиотека стандартных программ. Она представляет собой пакет программ наиболее широко используемых методов решения, например задач вычислительной математики. Библиотека доступна всем пользователям системы и широко используется при составлении прикладного математического обеспечения.

Пользователь, разрабатывающий программу, большую часть времени тратит на ее отладку и выявление ошибок. В целях снижения затрат времени на отладку в системе программирования имеются средства диагностики ошибок, выявленных при трансляции, а также некоторых ошибок при выполнении программы (например, деления на нуль, закливания отдельных частей программы и т. д.). Комплекс программ диагностики составляет систему отладки.

Разработка САПР в большей степени зависит от наличия развитых ОС. Это прежде всего связано с необходимостью взаимодействия пользователя с САПР. Взаимодействие обусловлено итерационной природой проектирования, наличием итерационной «коптура» включающего пользователя и ЭВМ. Пользователь задает параметры для расчета и на основе полученных результатов вносит изменения. Этот процесс будет более эффективным при на-

личии взаимодействующих ОС. Требование практики решения задачи проектирования находит отражение в постоянном совершенствовании ОС, наделении их качествами, облегчающими взаимодействие пользователя — неспециалиста в области вычислительной техники с САПР. К таким свойствам ОС можно отнести удобство организации больших информационных систем (файлов), совершенство и простоту организации операций ввода-вывода числовой и графической информации, надежность операционной системы, оперативность взаимодействия системы пользователь — САПР, совместимость пакетной обработки заданий и в режиме интерактивного взаимодействия, развитую систему отладки и редактирования. Все большее применение в САПР находят мини-ЭВМ, хотя они имеют существенный недостаток, обусловленный слабостью ОС. Причина этого состоит в стремлении производителей ЭВМ создавать ОС, ориентированные на малые объемы памяти.

Языки обработки графической информации в САПР развиваются в основном по двум направлениям: на базе алгоритмических языков типа фортран, ПЛ-1, алгол с использованием механизма подпрограмм для вывода заданных графических изображений, состоящих из таких элементов, как точка, прямая, дуга, окружность, текст и т. д.; и путем расширения алгоритмических языков добавлением новых синтаксических элементов для описания графической информации компактным образом. Применение подобных языков неудобно в том смысле, что для каждого конкретного документа необходимо составлять новые программы, что требует высокой квалификации в области программирования. Более рациональным является направление по созданию проблемно-ориентированных графических языков для описания объектов различной геометрии: объектов ортогональной геометрии в двумерном и трехмерном пространстве (проектирование зданий и элементов зданий, компоновка и размещение оборудования); объектов, ограниченных гладкими поверхностями второго и большего порядка; объектов, получаемых в технологии резания (например, машиностроительных конструкций) [8—10].

Для построения таких языков используются следующие подходы: восстановление геометрического образца из двумерных геометрических изображений — проекций объекта, перемещение двумерного объекта (образующей) по некоторой траектории и использование объемных базовых элементов формы. В первом случае в памяти ЭВМ имеются все характерные точки проекции чертежа детали и характеристики связывающих их элементов. Эти данные используются для восстановления структуры объекта в трехмерном пространстве. Программное обеспечение строится на основе графоаналитических методов. Во втором — для восстановления геометрии объекта необходимо иметь образующую тела вращения и закон ее перемещения. В третьем случае образ объекта

строится комбинацией элементарных образов с помощью специальных операций типа вычитания, объединения и т. д. При этом элементарные образы полностью определены геометрически и ортогонализированы в пространстве.

ЛИТЕРАТУРА

1. Назаров Д. В., Коняков Н. Е. Автоматизированное рабочее место инженера-конструктора // Приборы и системы управления. 1975. № 1. С. 11—13.
2. Тимошук Д. С., Титкин И. В. Диалоговые системы в автоматизированном проектировании объектов строительства // Обзор по электронике в технике. 1979. Сер. 7. С. 35—40.
3. Башмаков И. Л. Пакеты прикладных программ — новая компонента архитектуры математического обеспечения ЭВМ третьего поколения // Тр. МЭИ. 1975. Вып. 221. С. 5—15.
4. Якубайтис Э. А. Архитектура вычислительных сетей. М.: Статистика, 1980. 279 с.
5. Жожикашвили В. А., Ирузов Б. С. Телеинформационные сети САПР: (Постановка проблемы) // Тр. II Всесоюз. совещ. «Автоматизация проектирования и конструирования». Л.: 1983. С. 7—9.
6. Девис Д., Барбер Д. Сети связи для вычислительных машин. М.: Мир, 1976. 680 с.
7. Barber D. An European informatics networks: Achievement and prospects. INNG. Gen. Note. 1976. N 117. P. 1—7.
8. Hatvany J., Newman W., Sabin M. A world survey of computer-aided design // Comput.-Aided Design. 1977. Vol. 9, N 2. P. 79—107.
9. Зазулевич Д. М. Машинная графика в автоматизированном проектировании. М.: Машиностроение, 1976. 236 с.
10. Вернер К. Х. Обработка графической информации с помощью вычислительной техники. М.: Машиностроение, 1976. 254 с.

Глава 7

ПРИКЛАДНОЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ СИСТЕМ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ

Математическое моделирование как метод исследования в настоящее время получил широкое распространение и во многих аспектах представляется разработанным. Сочетая достоинства теоретических и экспериментальных методов исследования, математическое моделирование позволяет не только исследовать явления, недоступные физическому моделированию (в силу сложности или невозможности технической реализации), но и обобщать результаты на основе многократного использования модели и делать прогнозы о возможном поведении процесса при изменении определяющих параметров (численный эксперимент).

Говоря о математическом моделировании, мы подразумеваем воспроизведение реально протекающих явлений на модели. Адекват-

ватность, т. е. соответствие результатов моделирования экспериментальным данным, полученным на реальном объекте, определяется уровнем знаний о процессе и обоснованностью принятых допущений.

Ядром математического моделирования является понятие модели — математически формализованного представления знаний об объекте (математического описания), снабженного алгоритмом решения и реализованного в виде программы на некотором алгоритмическом языке. Важным является то, что, понимая явление (процесс), исследователь имеет возможность сконцентрировать внимание на доминирующих факторах явления (процесса), т. е. анализировать последнее как бы в «чистом» виде, исключая «фоновые» эффекты путем принятия соответствующих допущений. «... Может показаться, что чем ближе модель к действительности, тем точнее ее прогнозы и тем эффективнее, следовательно, управление. К сожалению, это не так. Реальный мир настолько обилён деталями, что, попытавшись построить математическую модель, очень близкую к действительности, мы очень скоро запутываемся в погоне за сложнейшими уравнениями, которые содержат неизвестные величины и неизвестные функции. Определение же этих функций ведет к еще более сложным уравнениям, с еще большим числом величин и функций — и так до бесконечности» [1]. Возможность описания объекта с необходимой точностью при сохранении качественного соответствия является замечательным свойством модели, позволяющим применять последнюю на различных (по степени детализации) уровнях исследования процесса (микро- и макроуровнях, на уровне отдельного аппарата и химического производства).

Основу математической модели составляет ее математическое описание — функциональное соотношение между входными (определяющими), выходными и управляющими параметрами объекта;

$$Y = F(X, U),$$

где X , Y , U — соответственно входные, выходные и управляющие параметры.

Математическое описание является отражением физической сущности процесса со свойственными ему особенностями и ограничениями. Существует несколько подходов к составлению описания, среди которых наиболее распространенными являются детерминированный и стохастический.

Детерминированное описание строится на основе анализа химической и физической сущности моделируемого объекта и состоит из фундаментальных законов и закономерностей химической кинетики, термодинамики, законов сохранения массы, энергии. Оно учитывает такие явления, как диффузию, тепло- и массоперенос, гидродинамику потоков.

Стохастическое описание строится на основе статистически вероятных соотношений между входными и выходными параметрами объекта. Поскольку процессам химической технологии свойственна детерминированно-стохастическая природа, более обоснованным описанием объекта будет такое, в котором отражены обе эти составляющие, причем последняя по своей природе отражает нестационарность процесса, вызванную различием времени пребывания элементов потока в аппарате, неравномерностью распределения субстанции в объеме.

Математическое описание типовых процессов химической технологии обычно выражается определенными классами уравнений. Это часто позволяет формализовать процесс его составления, существенно облегчает задачу разработки алгоритмов. Благодаря тому, принцип изоморфности математического описания позволяет в результате решения одной конкретной задачи получить информацию о свойствах целого класса объектов с аналогичными тематическими описаниями. Подобным примером являются дифференциальные уравнения, описывающие различные по природе явления формально аналогичными соотношениями [2]: перенос количества энергии (закон трения)

$$\tau = -\mu d\omega/dx \text{ (закон Ньютона);}$$

перенос тепла (тепловой поток)

$$q = -\lambda dt/dx \text{ (закон Фурье);}$$

перенос вещества (поток вещества)

$$q_b = -Ddc/dx \text{ (закон Фика);}$$

перенос электричества

$$i = du/dx \text{ (закон Ома).}$$

Поистине, «невозможно избавиться от ощущения, что математические формулы существуют независимо от нас и обладают собственным разумом, что они мудрее нас, мудрее даже тех, кто их открыл, и что мы извлекаем из них больше, чем первоначально было заложено» (Г. Герц [1]).

На рис. 7.1 представлена связь между описанием типовых процессов химической технологии и типом уравнений математического описания.

Различают непрерывный и периодический способы организации технологического процесса. Периодический процесс характеризуется тем, что параметры состояния изменяются во времени от некоторого начального (загрузка сырья) до конечного (отгрузка продукта) состояния. Такие процессы часто используются в малотоннажной технологии (медицинской, фармацевтической, лакокрасочной промышленности). Математическое описание периодического

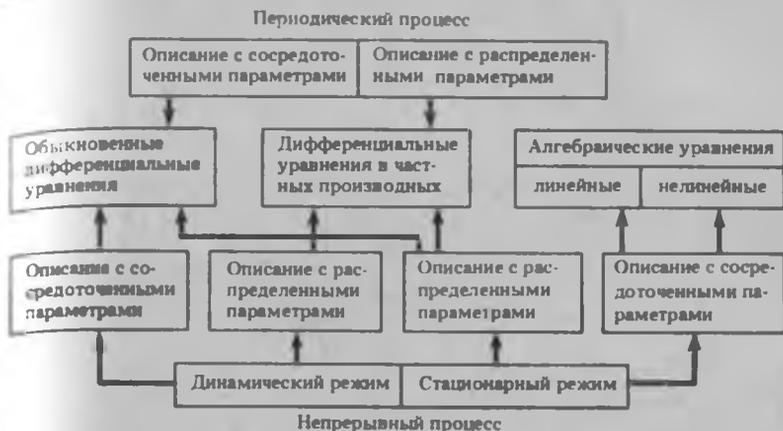


Рис. 7.1. Связь между описанием и типом уравнений

дических процессов строится на основе дифференциальных уравнений (обыкновенных или в частных производных).

Непрерывный процесс характеризуется тем, что сырье поступает, а продукты отбираются непрерывно с постоянной скоростью. Технологический процесс при непрерывном способе организации может протекать в стационарном или динамическом режиме. В зависимости от способа его организации используются различные типы уравнений.

Другой характеристикой процесса является способ распределения параметров (например, ввода сырья, управления температурным режимом трубчатого реактора) — сосредоточенный или распределенный. Этим определяется использование дифференциальных уравнений в частных производных или обыкновенных.

Факторы общности, присущие математическому описанию, методам решения, приемам программирования, позволяют ставить вопрос об уменьшении интеллектуальной сложности разработки моделей, т. е. об автоматизации программирования.

7.1. Технологический цикл разработки модели

Имея дело с конкретной предметной областью, специалист обладает определенной системой знаний, выраженной в форме качественных или количественных соотношений, и интуитивно предполагает возможность их использования для решения некоторой задачи. Если задача полностью определяется системой имеющихся знаний, то разработка модели заключается в формулировании определенных понятий и отношений между ними с учетом зависимости проблемных знаний. Чаще система известных знаний о предметной области недостаточна для разрешения



Рис. 7.2. Формирование ППП

всех зависимостей между понятиями, связанными с постановкой задачи. Тогда формулирование задачи проводится на основе имеющихся закономерностей с использованием прогнозирующей способности и интуитивных обобщений. В другом случае вводятся упрощения в постановку задачи, связанные с пренебрежением отдельными зависимостями. Очевидно, принимаемые допущения должны учитываться при интерпретации результатов. В любом случае разработка математической модели есть реализация отображения

$$M \leftarrow \{Z, K, G_K, Q\}, \quad (7.1)$$

где Z — задача; K — базовые знания; G_K — информация о структуре знаний; Q — средства реализации модели (технические и программные). Полученная математическая модель (как и решение) является новым элементом функциональной среды, расширяющим представления о предметной области, и поэтому после соответствующей подготовки должна быть включена в ППП. Обобщенная схема формирования функциональной среды (ППП) представлена на рис. 7.2.

Выполнение отдельных этапов разработки моделей и собственно моделирование могут осуществляться различными по специализации и квалификации исполнителями, но должны обязательно подчиняться единой цели, поставленной при формулировании задачи. Каждый из этапов достаточно сложен, и имеется

опасность чрезмерного «увлечения» разработкой одного из них и ущерб остальным. Такая ситуация возможна при недостаточной подготовке специалиста в таких вопросах, как технология процесса, математическое описание, вычислительная математика и программирование.

В последнее время, особенно с внедрением ЭВМ третьего и четвертого поколений, большое внимание уделяется автоматизации разработки моделей, унификации вычислительных методов и моделей, в частности созданию моделирующих систем, пакетов прикладных программ, а также разделению функций разработки и использования моделей и систем. Модели и системы все больше ориентируются на широкого потребителя и снабжаются средствами диагностики и обмена. Однако на современном этапе это не освобождает пользователя от необходимости изучения элементов вычислительной техники и основ моделирования.

Автоматизация программирования. Предметом автоматизации программирования является поиск методов уменьшения интеллектуальной сложности решения задач за счет переложения части технологического цикла разработки модели на ЭВМ. В качестве примера способов приближения к этой цели можно отметить идеи, связанные с алгоритмическими языками, модульным и структурным программированием и «интеллектуальными» ППП [3]. Первая из них связана с выработкой универсальной системы понятий для задания алгоритмов и реализации этой системы в рамках алгоритмического языка. Этот подход находит практическую реализацию в создании проблемно-ориентированных языков высокого уровня (типа ЛИСП, СИМУЛА и т. д.) и позволяет существенно упростить переход от алгоритма к программе по сравнению с машинными и машинно-ориентированными языками.

Вторая идея состоит в разработке способов эквивалентной декомпозиции программ на стадии проектирования алгоритма на ряд модулей меньшей сложности. Этот подход широко применяется в практике составления объемных программ исходя из других, нежели автоматизация программирования, предпосылок с целью удовлетворения требований по объему занимаемой оперативной памяти ЭВМ и упрощения процесса программирования и унификации отдельных вычислительных алгоритмов.

Третья идея состоит в наделении пакетов программ свойствами интеллектуальности за счет использования в структуре пакета некоторой модели принятия решений. Попытки реализации этой идеи основаны на использовании аппарата фреймов [4, 5].

Различные подходы к автоматизации программирования носят частный характер в виде конкретных примеров, но не являются приложением фундаментальной теории составления программ. Более того, и сама задача, и метод ее решения могут быть сформулированы лишь в контексте предметной области, когда математическая модель исследуемого явления сочетается с общема-



Рис. 7.2. Формирование ФФП

всех зависимостей между понятиями, связанными с постановкой задачи. Тогда формулирование задачи проводится на основе имеющихся закономерностей с использованием прогнозирующей их способности и интуитивных обобщений. В другом случае вводятся упрощения в постановку задачи, связанные с пренебрежением отдельными зависимостями. Очевидно, принимаемые допущения должны учитываться при интерпретации результатов. В любом случае разработка математической модели есть реализация отображения

$$M \leftarrow \{Z, K, G_K, Q\}, \quad (7.1)$$

где Z — задача; K — базовые знания; G_K — информация о структуре знаний; Q — средства реализации модели (технические и программные). Полученная математическая модель (как и решение) является новым элементом функциональной среды, расширяющим представления о предметной области, и поэтому после соответствующей подготовки должна быть включена в ФФП. Обобщенная схема формирования функциональной среды (ФФП) представлена на рис. 7.2.

Выполнение отдельных этапов разработки моделей и собственно моделирование могут осуществляться различными по специализации и квалификации исполнителями, но должны обязательно подчиняться единой цели, поставленной при формулировании задачи. Каждый из этапов достаточно сложен, и имеется

опасность чрезмерного «увлечения» разработкой одного из них в ущерб остальным. Такая ситуация возможна при недостаточной подготовке специалиста в таких вопросах, как технология процесса, математическое описание, вычислительная математика и программирование.

В последнее время, особенно с внедрением ЭВМ третьего и четвертого поколений, большое внимание уделяется автоматизации разработки моделей, унификации вычислительных методов и моделей, в частности созданию моделирующих систем, пакетов прикладных программ, а также разделению функций разработки и использования моделей и систем. Модели и системы все больше ориентируются на широкого потребителя и снабжаются средствами диагностики и взаимодействия. Однако на современном этапе это не освобождает пользователя от необходимости изучения элементов вычислительной техники и основ моделирования.

Автоматизация программирования. Предметом автоматизации программирования является поиск методов уменьшения интеллектуальной сложности решения задач за счет переложения части технологического цикла разработки модели на ЭВМ. В качестве примера способов приближения к этой цели можно отметить идеи, связанные с алгоритмическими языками, модульным и структурным программированием и «интеллектуальными» ППП [3]. Первая из них связана с выработкой универсальной системы понятий для задания алгоритмов и реализации этой системы в рамках алгоритмического языка. Этот подход находит практическую реализацию в создании проблемно-ориентированных языков высокого уровня (типа ЛИСП, СИМУЛА и т. д.) и позволяет существенно упростить переход от алгоритма к программе по сравнению с машинными и машинно-ориентированными языками.

Вторая идея состоит в разработке способов эквивалентной декомпозиции программ на стадии проектирования алгоритма на ряд модулей меньшей сложности. Этот подход широко применяется в практике составления объемных программ исходя из других, нежели автоматизация программирования, предпосылок с целью удовлетворения требований по объему занимаемой оперативной памяти ЭВМ и упрощения процесса программирования и унификации отдельных вычислительных алгоритмов.

Третья идея состоит в наделении пакетов программ свойствами интеллектуальности за счет использования в структуре пакета некоторой модели принятия решений. Попытки реализации этой идеи основаны на использовании аппарата фреймов [4, 5].

Различные подходы к автоматизации программирования носят частный характер в виде конкретных примеров, но не являются приложением фундаментальной теории составления программ. Более того, и сама задача, и метод ее решения могут быть сформулированы лишь в контексте предметной области, когда математическая модель исследуемого явления сочетается с общема-

тематическим знанием. Существующая практика программирования такова, что знание, воплощенное в условии задачи, не находит неискаженного выражения в программе, а служит лишь справочной информацией для программиста [6]. Отсутствие общей теории составления программ приводит к тому, что программирование является своего рода «искусством»: несмотря на одинаковые исходные условия задачи и методы ее решения качество программы (ее эффективность) зависит от квалификации программиста. Изменение подобной ситуации ведется по пути создания научных основ доказательного программирования, примерами которого могут служить синтезирующее, сборочное и конкретизирующее программирование, суть которого заключается в следующем. Синтезирующее программирование — это программирование в его наиболее чистом виде, т. е. процесс получения модели исходя из условия задачи и метода ее решения [7]. Сборочное программирование — это составление модели из заранее заготовленных ее частей, т. е. модулей. Процесс разработки модели заключается в этом случае в установлении информационно-логических связей между отдельными модулями. Конкретизирующее программирование в некотором смысле противоположно сборочному — оно дает метод построения специализированных моделей на основе разработки теории конкретной предметной области. Нетрудно видеть, что при разработке ППП все три подхода находят применение.

Характерной особенностью современного состояния проблемы моделирования типовых процессов химической технологии является наличие общей методологии разработки моделей [2, 8] и самих моделей на уровне учета фундаментальных закономерностей (на макроуровне), т. е. его доказательность. Совершенствование идет по пути углубления знаний на микроуровне, что в общей задаче моделирования находит отражение в снятии тех или иных допущений. В соответствии со стратегией системного анализа [8] эта тенденция положительно влияет на развитие теории и практики автоматизированного проектирования. По мере создания моделей на микроуровне усиливается прогнозирующая способность моделей, уменьшается объем априорной информации. В рамках известного математического описания все это способствует решению задачи автоматизации программирования, особенно если имеются «алгоритмы-оболочки», для которых определенный класс проектируемых объектов реализуется частными алгоритмами.

Выбор метода и алгоритма решения. Несмотря на рост мощности вычислительных средств (по быстродействию и объему оперативной памяти) проблемы выбора эффективного метода решения и соответствующего алгоритма остаются актуальными, так как при увеличении мощности растет размерность решаемых задач. При выборе метода обычно ставится задача обеспечения максимального, быстродействия при минимуме занимаемой програм-

мой памяти. Использование итерационных методов (а они составляют большинство методов вычислительной математики) отвечает требованиям минимизации занимаемой памяти, однако не всегда обеспечивает требуемое быстродействие. Метод должен обеспечивать, во-первых, сходимость при любом начальном приближении и, во-вторых, с приемлемым быстродействием. Далеко не много методов удовлетворяют этим требованиям. Например, метод релаксации в общем случае обеспечивает сходимость решения при любом начальном приближении, но весьма и весьма медленно. Методы же типа Ньютона—Рафсона обладают квадратичной сходимостью, но не при любом начальном приближении. В связи с этим одной из сложных проблем при использовании итерационных методов является обеспечение сходимости решения в широком диапазоне изменения параметров процесса.

Прежде чем выбрать тот или иной численный метод, необходимо подвергнуть функцию или систему уравнений аналитическому исследованию. При этом весьма часто исходная функция может быть таким образом преобразована, что применение известного метода будет эффективным. Например, для решения уравнения (4.22), представленного в виде

$$f(T) = \sum_i \gamma_i x_i P_i^0 / (\varphi_i P) - 1 = 0,$$

можно воспользоваться любым из методов решения уравнений с одним неизвестным, например методом касательных. Решение будет получено за 5—10 итераций. Если же это уравнение записать в виде

$$f(T) = \ln \left(\sum_i \gamma_i x_i P_i^0 \right) - \ln (\varphi_i P) = 0,$$

то при использовании того же метода решение будет получено за 1—2 итерации.

Существенным моментом при выборе метода является размерность задачи. Некоторые методы эффективны при решении небольших задач, однако с увеличением числа переменных объем вычислений настолько возрастает, что приходится от них отказываться. Такого класса задачи обычно имеют место при решении систем уравнений, поиске оптимальных значений параметров многомерных функций. Соответствующим выбором метода можно уменьшить время решения задачи и объем занимаемой памяти. Это особенно эффективно при оперировании с разреженными матрицами, появляющимися при решении дифференциальных уравнений разностными методами или расчете многоступенчатых аппаратов.

Аналогично выбор алгоритма решения за счет надлежащего порядка выполнения операций позволяет снизить время выполнения программы, а также уменьшить накопление ошибок округ-

ления. Например, при решении системы уравнений, имеющей точность до трех знаков после запятой,

$$0,003x_1 + 3,000x_2 = 2,001;$$

$$1,000x_1 + 1,000x_2 = 1,000,$$

методом исключения (методом Гаусса) получим

$$1,000x_1 + 1000x_2 = 667;$$

$$999x_2 = 666.$$

Отсюда $x_2 = 0,667$; $x_1 = 0,000$. Однако если систему уравнений переписать в виде

$$3,000x_2 + 0,003x_1 = 2,001;$$

$$1,000x_2 + 1,000x_1 = 1,000$$

и произвести аналогичные действия, то будет получено $x_1 = 0,333$; $x_2 = 0,667$.

Отсюда следует, что, во-первых, погрешности округления могут привести к совершенно неверным результатам и, во-вторых, их влияние можно свести к минимуму соответствующей организацией вычислений.

В качестве другого примера, иллюстрирующего важность оптимизации алгоритма вычислений, можно привести находящиеся произведения матриц [9] по формуле

$$C = A \times B \text{ или } c_{ij} = \sum_{k=1}^M a_{ik}b_{kj}.$$

Структура программы на фортране имеет вид

DO11 = 1, M — переход к очередной строке матрицы результата;

DO1J = 1, M — переход к очередному элементу в матрице результата;

DO1K = 1, M — счет одного элемента матрицы результата;

$$1C(I, J) = C(I, J) + A(I, K) \times B(K, J).$$

Если поменять местами циклы по j и k в этой программе, то будем иметь

DO11 = 1, M — переход на очередную строку результирующей матрицы;

DO1K = 1, M — переход к очередному слагаемому для всех элементов строки матрицы результата;

DO1J = 1, M — суммирование очередного слагаемого со всеми элементами строки матрицы результата;

$$1C(I, J) = C(I, J) + A(I, K) \times B(K, J).$$

Отличие программ состоит в изменении последовательности выборки элементов массива A . При $M = 64$ для ЭВМ Крей-1 быстродействие возрастает с 50 до 58 мегафлопов (миллионов операций с плавающей точкой в секунду). Эти примеры показывают, что искусство программиста пока остается доминирующим фактором в разработке оптимальных моделей и вряд ли в ближайшем будущем может быть формализовано.

Адекватность модели. Важным этапом разработки модели является установление адекватности ее моделируемому объекту. По существу, это проверка правомерности принятых упрощений при формулировании задачи и составлении математического описания. Основным методом установления адекватности является сравнение расчетных и экспериментальных данных. При наличии существенных различий необходимо либо вносить изменения в математическое описание, либо проводить коррекцию модели путем минимизации рассогласования расчетных и экспериментальных данных, что выражается в изменении (введении) так называемых корректирующих параметров.

Сложнее вопрос о точности модели решается при отсутствии экспериментальных данных, это именно тот вопрос, который особенно важен при решении задач проектирования. В настоящее время не существует готовых математических или логических методов контроля точности моделей. Практические методы разрабатываются индуктивно на основе обобщения опыта моделирования и имеют форму эвристических рекомендаций, которые, в общем-то, не гарантируют оптимальности построенной модели. Стратегия поиска оптимальной по сложности и точности математической модели может быть следующей. В результате анализа исходных предпосылок создается полный математический образ проектируемого процесса в виде ППП. При выполнении программ производится оценка результатов, их соответствие ограничениям, количественным и качественным характеристикам проекта. При несоответствии результатов проектирования заданным требованиям создается новый образ процесса, который оценивается аналогично. Альтернативой такому подходу является создание упрощенного образа процесса, который будет усложняться по мере оценки результатов проектирования. Усложнение будет проводиться до тех пор, пока не выполняются все требования, предъявляемые к проекту, или не исчерпаются ресурсы проектирования (программное обеспечение). В последнем случае решение о дальнейших действиях принимает пользователь. Развиваемые в работах [10—13] практические принципы достижения компромисса между сложностью и точностью моделей основаны именно на таком подходе. Основным при этом является принцип наименьшей сложности, в соответствии с которым рациональным выбором модели T считается такой, что

$$C(T^*) = \min C(T); \quad T \in M(e_0), \quad (7.2)$$

где $C(T)$ — скалярная характеристика сложности модели; $M(\epsilon_0)$ — множество моделей с допустимой собственной погрешностью ϵ_0 . Собственная погрешность модели T определяется суммой систематической и случайной составляющих. Детализация условий процесса решения экстремальной задачи (7.2) проводится в соответствии с другими принципами: принципом множественности предусматривающим разработку множества моделей $M(\epsilon)$; принципом многообразия элементов модели, указывающим на целесообразность использования модульного принципа при формировании множества моделей M ; принципом динамичности моделирования, предусматривающим последовательность формирования моделей $T_i \in M$ с использованием результатов испытания предыдущих; принципом баланса точностей, постулирующим соответствие собственной и внесенной (за счет неточности параметров и неполноты описания) погрешностей; принципом рационального распределения допустимой погрешности между элементами модели, что допускает поиск экстремума (7.2) поэлементно; принципом локального выравнивания погрешностей, указывающим на возможность локальных упрощений составляющих модулей; принципом максимальной инвариантности результатов моделирования к неточностям исходных данных.

Указанные принципы задают ограничения на выбираемую модель, которые удается сформулировать в терминах точности, сложности, чувствительности и других общих характеристик модели. В частности, со второго по шестой принципы позволяют сформулировать методы выбора корректной модели последовательным ее усложнением.

В качестве методов косвенного контроля точности моделей можно воспользоваться следующими. Во-первых, покомпонентной проверкой точности с последующим пересчетом погрешностей элементов на модель в целом. Во-вторых, определением погрешности по разбору результатов, полученных с помощью моделей, упрощаемых различными способами. В-третьих, контролем погрешности по сходимости результатов расчета по ряду регулярно усложняемых моделей. Отсюда видно, что все методы проверки предполагают решение задачи поиска экстремума (7.2), только исходят из различных предпосылок.

Относительно выбора языка программирования при разработке математической модели следует заметить, что в соответствии с принципом разработки САПР, постулирующим реализацию минимальными средствами, разработку прикладного программного обеспечения целесообразно вести средствами системного обеспечения ЭВМ в ОС ЕС или ОС РВ (для ЕС ЭВМ и СМ ЭВМ соответственно). На практике наиболее распространенными языками программирования являются языки ассемблер, фортран и ПЛ-1.

Формирование модуля. Программа, предназначенная для использования в виде элемента системы и оформленная в соответ-

нии с определенными правилами, носит название модуля. Модулем еще называют программу, прошедшую однократную трансляцию. Так или иначе модуль является элементарной единицей прикладного программного обеспечения и может использоваться как автономно, так и в системе. Правила оформления модуля, вообще говоря, зависят от особенностей системы, в которой он будет использоваться, а также от языка программирования. Представление прикладных программ в виде модулей, по существу, является формой унификации правил их составления. Это облегчает их использование в различных по назначению системах, упрощает объединение с другими модулями. Для указания характеристик каждый модуль должен сопровождаться своего рода паспортом, в котором содержится следующего рода информация: описание задачи; математическая формулировка с перечнем принятых допущений и описание алгоритма решения; название модуля и название языка, на котором он написан; перечень и назначение входных и выходных параметров; описание схем реализации для многоцелевых модулей с указанием входов и выходов для каждой схемы; указание операторов ввода-вывода с определением вводимых и выводимых переменных; указание характеристик по быстродействию, объему занимаемой памяти; указание ресурсов ЭВМ для выполнения модуля; описание исключительных ситуаций и рекомендации по их преодолению; список других программ, которые используются при выполнении модуля; описание контрольного примера, исходных данных и результатов расчета. Паспорт может храниться вместе с модулем как примечание или в специальной библиотеке.

Таким образом, важнейшими понятиями программного модуля являются множество входных и выходных параметров, функции модуля, используемые методы, особенности алгоритмов и т. д. Для целей автоматизации процесса конкретной «привязки» модуля в зависимости от исходных данных удобно представить его в виде фрейма (см. гл. 4). Фреймовый модуль будет представлять собой многоуровневую структуру лексем естественного языка, идентификаторов программных модулей, адресов БД. При использовании этого модуля для получения нового результата заполняются соответствующие терминалы фрейма и проводится его активизация. Аппарат фреймов является развивающимся подходом в создании ИИИ не только в приложениях, но и в системах «искусственного интеллекта» [14, 15].

7.2. Общие вопросы построения пакетов прикладных программ

Прикладное математическое обеспечение является фундаментом проблемы, на котором строится ее решение. От того, насколько совершенно по содержанию и организации прикладное математическое обеспечение, зависит эффективность решения задачи.

где $C(T)$ — скалярная характеристика сложности модели; $M(\epsilon_0)$ — множество моделей с допустимой собственной погрешностью ϵ_0 . Собственная погрешность модели T определяется суммой систематической и случайной составляющих. Детализация условий процесса решения экстремальной задачи (7.2) проводится в соответствии с другими принципами: принципом множественности предусматривающим разработку множества моделей $M(\epsilon)$; принципом многообразия элементов модели, указывающим на целесообразность использования модульного принципа при формировании множества моделей M ; принципом динамичности моделирования, предусматривающим последовательность формирования моделей $T_i \in M$ с использованием результатов испытания предшествующих; принципом баланса точностей, постулирующим соответствие собственной и внесенной (за счет неточности параметров и неполноты описания) погрешностей; принципом рационального распределения допустимой погрешности между элементами модели, что допускает поиск экстремума (7.2) поэлементно; принципом локального выравнивания погрешностей, указывающим на возможность локальных упрощений составляющих модулей; принципом максимальной инвариантности результатов моделирования к неточностям исходных данных.

Указанные принципы задают ограничения на выбираемую модель, которые удается сформулировать в терминах точности, сложности, чувствительности и других общих характеристик модели. В частности, со второго по шестой принципы позволяют сформулировать методы выбора корректной модели последовательным ее усложнением.

В качестве методов косвенного контроля точности моделей можно воспользоваться следующими. Во-первых, покомпонентной проверкой точности с последующим пересчетом погрешностей элементов на модель в целом. Во-вторых, определением погрешности по разбору результатов, полученных с помощью моделей, упрощаемых различными способами. В-третьих, контролем погрешности по сходимости результатов расчета по ряду регулярно усложняемых моделей. Отсюда видно, что все методы проверки предполагают решение задачи поиска экстремума (7.2), только исходя из различных предпосылок.

Относительно выбора языка программирования при разработке математической модели следует заметить, что в соответствии с принципом разработки САПР, постулирующим реализацию минимальными средствами, разработку прикладного программного обеспечения целесообразно вести средствами системного обеспечения ЭВМ в ОС ЕС или ОС РВ (для ЕС ЭВМ и СМ ЭВМ соответственно). На практике наиболее распространенными языками программирования являются языки ассемблер, фортран и ПЛ-1.

Формирование модуля. Программа, предназначенная для использования в виде элемента системы и оформленная в соответ-

ствии с определенными правилами, носит название модуля. Модулем еще называют программу, прошедшую однократную трансляцию. Так или иначе модуль является элементарной единицей прикладного программного обеспечения и может использоваться как автономно, так и в системе. Правила оформления модуля, вообще говоря, зависят от особенностей системы, в которой он будет использоваться, а также от языка программирования. Представление прикладных программ в виде модулей, по существу, является формой унификации правил их составления. Это облегчает их использование в различных по назначению системах, упрощает объединение с другими модулями. Для указания характеристик каждый модуль должен сопровождаться своего рода паспортом, в котором содержится следующего рода информация: описание задачи; математическая формулировка с перечнем принятых допущений и описание алгоритма решения; название модуля и название языка, на котором он написан; перечень и назначение входных и выходных параметров; описание схем реализации для многоцелевых модулей с указанием входов и выходов для каждой схемы; указание операторов ввода-вывода с определением вводимых и выводимых переменных; указание характеристик по быстродействию, объему занимаемой памяти; указание ресурсов ЭВМ для выполнения модуля; описание исключительных ситуаций и рекомендации по их преодолению; список других программ, которые используются при выполнении модуля; описание контрольного примера, исходных данных и результатов расчета. Паспорт может храниться вместе с модулем как примечание или в специальной библиотеке.

Таким образом, важнейшими понятиями программного модуля являются множество входных и выходных параметров, функции модуля, используемые методы, особенности алгоритмов и т. д. Для целей автоматизации процесса конкретной «привязки» модуля в зависимости от исходных данных удобно представить его в виде фрейма (см. гл. 4). Фреймовый модуль будет представлять собой многоуровневую структуру лексем естественного языка, идентификаторов программных модулей, адресов БД. При использовании этого модуля для получения нового результата выполняются соответствующие терминалы фрейма и проводится его активизация. Аппарат фреймов является развивающимся подходом в создании ППП не только в приложениях, но и в системах «искусственного интеллекта» [14, 15].

7.2. Общие вопросы построения пакетов прикладных программ

Прикладное математическое обеспечение является фундаментом проблемы, на котором строится ее решение. От того, насколько совершенно по содержанию и организации прикладное математическое обеспечение, зависит эффективность решения задачи.

Оно разнородно по точности и функциональному назначению, но в рамках САПР — как многоцелевого инструмента пользователя — должно рассматриваться как единое целое. Правильно в соответствии со стратегией разработки технологической схемы химического производства (см. рис. 4.2, 4.7) все программы можно разделить на отдельные относительно независимые совокупности подсистемы, связанные более четким функциональным назначением.

Эффективное использование подсистем и САПР в целом зависит от внутренней организации на логическом уровне (или ином другом) составляющих модулей. Разнородность решаемых системой задач (по постановке, характеру, точности и т. д.) диктует необходимость наличия гибкой связи между модулями и, следовательно, некоторых организующих программ. В простейшем случае модули могут быть организованы в соответствии с последовательностью выполняемых функций для решения некоторой задачи, образуя жестко связанные цепочки программ. Тогда САПР будет иметь столько цепочек, сколько имеется подзадач. Такой способ организации, хотя и часто используется при решении прикладных задач, свойствен простейшим вычислительным алгоритмам, предназначенным для одновариантных расчетов. Любое изменение в постановке задачи расчета вызывает необходимость вмешательства для коррекции последовательности расчета. К тому же при решении сходных задач будет дублирование отдельных модулей в вычислительных схемах.

Комплекс программ, предназначенный для решения определенной задачи или класса задач (проектной процедуры или класса процедур) и ориентированный на определенный класс пользователей, вместе с документацией, необходимой для его установки и эксплуатации, называется пакетом программ [16]. С позиций использования вычислительной техники пакеты являются базой для построения специализированных систем (САПР, АСУ и т. д.). Оформление прикладного обеспечения в виде пакетов программ предполагает наличие некоторой внутренней организации для облегчения работы проектировщика с САПР, расширения функций модулей.

Как уже отмечалось, пакеты содержат программы отдельных проектных процедур или их объединений (подсистем). Вследствие этого пакеты представляют собой комплексы программных средств, предназначенных для решения некоторого однородного класса задач. Имеется несколько способов их организации: библиотека программ, методо- и проблемно-ориентированные пакеты. В рамках САПР все они могут присутствовать, выполняя специфические функции.

Выбор способа организации пакета определяется несколькими факторами, среди которых можно выделить специализацию и частоту использования пакета, назначение и универсальность.

модулей, квалификацию пользователя. Библиотеки относятся к пакетам простой структуры и не содержат никаких средств внутреннего управления и сервисных средств. Методо- и проблемно-ориентированные пакеты, помимо библиотек модулей (или подпрограмм), могут содержать управляющую программу, транслятор с входного языка и набор сервисных средств.

Библиотека прикладных программ. Под библиотекой программ понимается упорядоченный (по месту, т. е. имеющий адрес размещения и имя) набор модулей, не связанных между собой функциональным назначением. Выделяют два вида библиотек: библиотеку стандартных программ или подпрограмм (подпрограмма — это программа, представленная в виде, пригодном для включения ее в другие программы) и библиотеку программ (подпрограмм) специального назначения.

К стандартным подпрограммам (для библиотек целесообразно использовать термин «подпрограмма», так как они обычно включаются в качестве частей в общую программу) можно отнести модули вычисления элементарных функций (тригонометрических, гиперболических и т. д.). Такая библиотека поставляется совместно с ЭВМ и обычно содержится в трансляторах с языков высокого уровня (алгола, фортрана, ПЛ-1). Стандартизацией обычно предусматривается единая форма идентификации и обращения к подпрограммам, фиксированный формализованный способ задания информации об аргументах и результате, единые правила описания алгоритмов и показателей эффективности. Набор таких подпрограмм можно считать установившимся для различных языков программирования. Отличие может быть обусловлено расширением возможностей языка.

Библиотеки программ создаются также на уровне методов решения типовых задач вычислительной математики. Это программы общего назначения, так как они не ориентированы на решение какой-либо прикладной задачи, а могут использоваться всякий раз, как возникнет необходимость в данном методе. Примером такой библиотеки может служить библиотека научных программ, разработанная для ЕС ЭВМ. Она содержит программы решения задач линейной алгебры, дифференциальных уравнений, экономизации памяти при обработке массивов информации большой размерности и т. д. В каждой области применения ЭВМ формируются и библиотеки специального назначения, содержащие программы решения типовых задач, например программы расчета типовых процессов.

Библиотеки программ внутренне не организованы. Каждая из них является независимой программной единицей. Она может использоваться либо самостоятельно, либо как часть более общей программы. В силу специфичности библиотечные программы обычно нуждаются в подробном описании и должны сопровождаться соответствующей документацией. Описание позволяет использо-

вать их разработчиками других систем без существенных работ. Программы библиотек обычно привязаны к определенному языку, и поэтому их использование ориентировано специалистов в области вычислительной техники. В этом заключается основной недостаток такого способа организации прикладного обеспечения.

При формировании общей программы библиотечные подпрограммы могут включаться двумя способами. В одном случае подпрограмма вставляется в программу в том месте, где происходит ее выполнение (открытая подпрограмма), а во втором — в месте выполнения формируются команды обращения к ней (закрытая подпрограмма). Оба способа находят применение на практике. Преимуществом закрытых подпрограмм является то, что независимо от количества обращений подпрограмма вызывается в рабочую область памяти однажды, занимая один и тот же объем памяти. Открытые подпрограммы, в свою очередь, проще в реализации. Включение подпрограмм в общую программу производится либо средствами языка программирования, либо средствами ОС.

Библиотека как совокупность подпрограмм является обязательным элементом системного и прикладного обеспечения ЕС ЭВМ. По существу, сама ОС является библиотекой, управляемой специальной программой. Для хранения программ пользователей в ОС также имеются специальные библиотеки.

Следует заметить, что наличие развитой системы библиотек в системном математическом обеспечении ЕС ЭВМ и СМ ЭВМ значительно облегчает создание систем за счет автоматизации многих организационных функций.

Методо-ориентированные пакеты программ. Основной предпосылкой создания методо-ориентированного пакета программ является применимость одного и того же метода для решения широкого класса задач. Широкое распространение эти пакеты находят в обработке экспериментальных данных. Обычно обработка данных заключается в установлении некоторой зависимости между параметрами и определении ее коэффициентов. Эта задача достаточно общая и находит применение в самых различных областях исследований. В простейшем случае различные задачи обработки данных отличаются исходными данными и видом функциональной зависимости. Если тематика прикладных задач весьма разнородна и постоянно изменяется, то ориентация пакетов на методы является лучшим способом решения таких задач.

Характерной особенностью методо-ориентированных пакетов программ является их незамкнутость. Действительно, такие пакеты позволяют лишь упростить процесс составления программы, но не освобождают пользователя от необходимости составления отдельных частей общей программы. Например, при наличии пакета программ для решения дифференциальных уравнений



Рис. 7.3. Решение задачи с помощью методо-ориентированного пакета программ

пужно помимо задания граничных условий и параметров интегрирования описать на языке, понятном ЭВМ, правые части системы.

Прикладные программы находятся в одной из библиотек, обслуживаемой ОС ЭВМ. Формирование пакета модулей для решения конкретной задачи производится либо средствами ОС, либо специальными управляющими программами. В библиотеке могут содержаться и пакеты управляющих операторов, обеспечивающие выполнение наиболее часто используемых последовательностей подпрограмм. При наличии таких пакетов составление программы максимально упрощается. На рис. 7.3 приведена примерная структура методо-ориентированной системы широкого назначения.

При разработке методо-ориентированных пакетов программ связь между модулями может устанавливаться различными способами. В одном случае модули пакета независимы и функциональные связи устанавливаются в зависимости от решаемой задачи с помощью операторов ОС. Такая форма связи свойственна пакетам широкого назначения. В другом случае между отдельными модулями может заранее предусматриваться внутренняя логическая связь, т. е. модули агрегируются в функциональные цепочки, которые могут объединяться, в свою очередь, между собой управляющей программой. При таком способе связей уже проявляется ориентация на определенный класс задач. Заметим, что любое объединение модулей упрощает составление рабочей

программы и специализирует пакет на решение конкретной задачи. Если решаемая задача находит регулярное применение, то ее целесообразно выделить в отдельный пакет, тем самым исключить необходимость повторного формирования рабочей программы.

Работа с методо-ориентированными пакетами программ требует достаточно высокой квалификации пользователя. По существу, при решении новой прикладной задачи приходится осуществлять все этапы разработки модели, начиная от постановки задачи и кончая отладкой. При многообразии решаемых задач нецелесообразна автоматизация вычислительных процессов и использование специализированных языков взаимодействия. Взаимообмен обычно осуществляется на уровне управляющих операторов и директив, а программирование — на базовом языке пакета программ.

Возможность описания различных явлений и процессов ограниченным количеством типов уравнений позволяет строить более совершенные методо-ориентированные пакеты программ. Так, для описания большинства процессов химической технологии можно использовать конечные линейные и нелинейные уравнения, дифференциальные уравнения обыкновенные и в частных производных (см. рис. 7.1). Решение указанных типов уравнений возможно с единых позиций.

Рассмотрим несколько примеров.

Пример 1. Пусть имеется система нелинейных алгебраических уравнений в общем виде:

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (7.3)$$

или в векторной форме:

$$F(X) = 0. \quad (7.4)$$

Для того чтобы найти решение системы уравнений (7.4), предположим, что имеется некоторый вектор начального приближения X^0 . Разложим функцию (7.4) в окрестности точки X^0 в ряд Тейлора до членов первого порядка:

$$F(X) \approx F(X^0) + A(X - X^0) = 0, \quad (7.5)$$

где

$$F(X^0) = \begin{pmatrix} f_1(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0) \\ f_2(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0) \\ \dots \\ f_n(x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0) \end{pmatrix};$$

A — матрица частных производных, имеющая вид

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix},$$

или $A = \partial F / \partial X$. Уравнение (7.5) можно переписать в виде

$$F(X) = AX + B = 0, \quad (7.6)$$

где $B = F(X^0) - AX^0$.

Уравнение (7.6) линейно относительно неизвестных x_1, x_2, \dots, x_n , и для нахождения вектора решения X при заданном начальном приближении X^0 необходимо решить систему линейных уравнений. Полученные значения X не будут решением системы уравнений (7.4) в силу произвольности выбора начального приближения. Решение можно получить в результате многократного решения системы (7.6), каждый раз используя вместо X^0 значения, найденные на предыдущей итерации. Если уравнение (7.6) переписать в виде

$$X_{i+1} = X_i - A^{-1}F(X_i), \quad (7.7)$$

то получим известную итерационную формулу Ньютона—Рафсона для решения системы нелинейных алгебраических уравнений. Здесь i — номер итерации.

При выполнении определенных условий итерационный процесс, задаваемый формулой (7.7), будет сходящимся.

Таким образом, в основе метода решения системы нелинейных уравнений лежит многократное решение системы линейных уравнений.

Пример 2. Пусть задана система обыкновенных дифференциальных уравнений вида

$$\dot{X} = F(X) \quad (7.8)$$

и известно решение в точке X^{n-1} :

$$F(X) |_{X=X^{n-1}} = F(X^{n-1}).$$

Разложим уравнение (7.8) в окрестности точки X^{n-1} в ряд Тейлора:

$$\dot{X} = F(X^{n-1}) - A(X - X^{n-1}) = AX + B, \quad (7.9)$$

где

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1^{n-1}} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2^{n-1}} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n^{n-1}} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1^{n-1}} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2^{n-1}} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_n^{n-1}} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix};$$

$$B = F(X^{n-1}) - AX^{n-1}.$$

Для интегрирования системы уравнений (7.9) воспользуемся одношаговой неявной формулой [11] вида

$$X^n = X^{n-1} + h[(I - W)\dot{X}^n + W\dot{X}^{n-1}], \quad (7.10)$$

где W — диагональная матрица корректирующих параметров. Введем функцию

$$G(X^n) = X^n - X^{n-1} - h[(I - W)\dot{X}^n + W\dot{X}^{n-1}] = 0. \quad (7.11)$$

Тогда, подставляя (7.9), получим

$$G(X^n) = [I - h(I - W)A]X^n - [WX^{n-1}h + (I - W)hB + X^{n-1}] = 0. \quad (7.12)$$

Отсюда

$$X^n = [I - h(I - W)A]^{-1} [WX^{n-1}h + (I - W)hB + X^{n-1}]. \quad (7.13)$$

Для линейной системы дифференциальных уравнений матрица A есть матрица коэффициентов исходной системы, не зависящих от x_i . Поэтому нахождение решения в точке X^n необходимо решить систему линейных алгебраических уравнений.

Таким образом, интегрирование системы линейных дифференциальных уравнений сводится к решению алгебраических уравнений с заданным шагом.

В случае нелинейной системы дифференциальных уравнений для решения уравнения (7.9) можно воспользоваться методом Ньютона—Рафсона, (см. формулу (7.7)). Для этого найдем матрицу частных производных $\partial G(X^n)/\partial X^n$:

$$\Phi(X^n) = [I - h(I - W)A(X^n)]. \quad (7.14)$$

Тогда

$$X_{i+1}^n = X_i^n - \Phi(X_i^{n-1})G(X_i^n), \quad (7.15)$$

или с учетом (7.9)

$$X_{i+1}^n = \Phi(X_i^n)^{-1} [WX_i^{n-1}h + (I - W)hB_i^n + X_i^{n-1}]. \quad (7.16)$$

Следовательно, для решения нелинейной системы дифференциальных уравнений необходимо на каждом шаге интегрирования многократное применение алгоритма решения системы линейных алгебраических уравнений.

Пример 3. Пусть имеется одномерное уравнение в частных производных параболического типа

$$\partial u / \partial t = \partial^2 u / \partial x^2. \quad (7.17)$$

Для решения уравнений в частных производных одним из широко применяемых методов является метод конечных разностей [12—14].

В нашем случае воспользуемся методом прямых, идея которого состоит в замене частных производных конечными разностями и сведении исходного уравнения (уравнений) к системе обыкновенных дифференциальных уравнений. Решение последней может быть выполнено методом, рассмотренным в примере 2.

Для преобразования уравнения (7.17) в систему обыкновенных дифференциальных уравнений воспользуемся следующей разностной схемой:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}. \quad (7.18)$$

Заметим, что могут быть применены и другие разностные схемы представления производной. Точность и эффективность схем зависят от граничных условий и членов, входящих в исходное уравнение. С учетом (7.18) уравнение (7.16) приводится к системе k уравнений первого порядка вида

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{u_{i+1} - 2u_i + u_{i-1}}{\Delta x^2}. \quad (7.19)$$

Естественно, при формировании системы (7.19) необходимо учитывать соответствующие граничные условия.

Пример 4. Пусть задано обыкновенное дифференциальное уравнение порядка

$$\partial^n y / \partial x^n = f(x, y^1, y^2, \dots, y^{n-1}). \quad (7.20)$$

Это уравнение может быть сведено к системе n уравнений первого порядка следующим образом:

$$dy/dx = y_1; \quad dy_1/dx = y_2;$$

$$dy_{n-1}/dx = y_n;$$

$$dy_n/dx = f(x, y_1, y_2, \dots, y_{n-1}).$$

Таким образом, в результате несложного преобразования можно перейти к системе уравнений первого порядка.

Из примеров (1)—(4) следует, что принципиально для решения различных классов уравнений (конечных или дифференциальных) можно воспользоваться единым алгоритмом, основу которого будут составлять методы решения алгебраических уравнений. Систему, способную решать перечисленные классы задач, необходимо рассматривать с точки зрения используемого метода, так как речь идет о типе уравнений для описания процесса, а не о самом процессе. Функциональная схема пакета прикладных программ для решения указанных типов уравнений и приведена на рис. 7.4.

Как следует из рис. 7.4, в общей задаче моделирования химико-технологического процесса функции пользователя ограничиваются постановкой задачи моделирования и составлением математического описания. Последнее должно быть представлено в виде, пригодном для ввода в систему. В частности, описание должно быть представлено в матричном виде. Пакет программ является незамкнутым, поэтому пользователь имеет возможность вносить любые изменения и дополнения в общую схему моделирования на языке системы. Это, прежде всего, ввод исходных данных и вывод результатов решения, включение функций управления вычислительным процессом и (при необходимости) форсирующих процедур для ускорения решения. Следовательно, необходимо иметь опыт программирования на рабочем языке пакета, в качестве которого обычно используются процедурно-ориентированные языки типа фортрана, ПЛ-1. Совершенствование методов формализации составления математического описания объекта позволяет еще в большей степени автоматизировать процесс моделирования.

По сравнению с методо-ориентированными пакетами широкого назначения специализированные пакеты значительно проще в эксплуатации. Внутренняя логическая связь модулей и совершенство численных методов существенно облегчают обязанности потребителя. В рассматриваемом случае, все, что необходимо, — это представление математического описания для системы конечных уравнений в виде

$$F(X) = AX + B = 0, \quad (7.21)$$

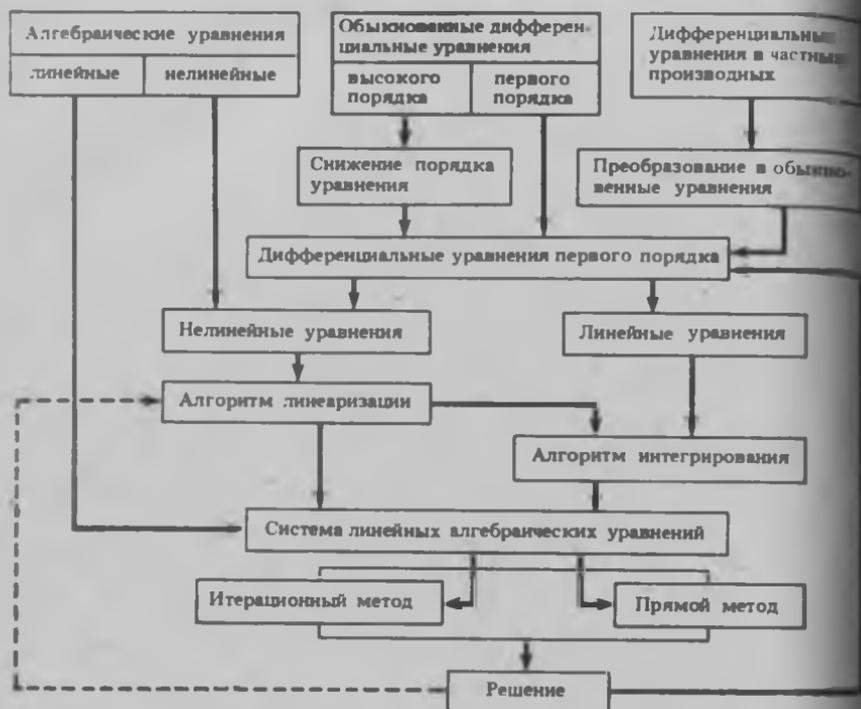


Рис. 7.4. Структура пакета программ общего назначения

для дифференциальных уравнений в виде

$$\dot{X} = AX + B \quad (7.22)$$

с соответствующими граничными условиями. Заметим, что для линейных систем матрица A имеет постоянные коэффициенты, а для нелинейных ее коэффициенты зависят от текущих значений элементов вектора решения. Для нелинейных систем формирование матрицы A и вектора B производится автоматически путем численного или аналитического определения частных производных.

Создание развитого методо-ориентированного пакета прикладных программ связано с решением ряда взаимосвязанных задач. Сюда относятся выбор конфигурации вычислительных средств, определяющий в конечном итоге размерность задачи, время ее решения, сервисное обслуживание, разработка в определенном смысле универсального алгоритма (алгоритмов), обеспечивающего заданную точность и надежную сходимости решения, обеспечение требований по минимизации памяти, занимаемой программами и информацией. Последнее важно вследствие матричного способа представления информации, когда значительная часть массивов

содержит нулевые элементы (например, при решении дифференциальных уравнений в частных производных разностными методами), обеспечение удобства эксплуатации и, как следствие, разработка сервисного математического обеспечения (например, создание специализированного языка взаимообмена).

Существенным моментом при создании специализированных пакетов прикладных программ является использование одного или ограниченной совокупности методов для решения широкого класса задач. Значительный опыт по разработке таких систем накоплен при решении дифференциальных уравнений, для описания динамических систем (расчет траекторий полета спутников, баллистика и т. д.). К таким системам можно отнести системы MIDAS [17], MIMIC [18], в основе которых используются формулы Рунге—Кутты различного порядка.

В качестве базового метода для решения задач химической технологии можно использовать метод квазилинеаризации, эффективность которого для расчета динамики процессов, оценки параметров дифференциальных уравнений, для расчета многостадийных процессов доказана [19, 20]. Этот метод удобен для решения крайних задач, часто возникающих, например, при моделировании реакторов вытеснения с учетом продольного перемешивания, использования диффузионной модели для описания условий массопередачи и т. д.

Пример 5. Рассмотрим реакцию вида



протекающую в изотермическом реакторе вытеснения. Предполагая постоянство объема реагентов и наличие продольного перемешивания, изменение концентрации реагента A по длине реактора описывается уравнением

$$\frac{1}{Pe} \frac{d^2x}{dl^2} - \frac{dx}{dl} - \frac{KL}{v} x^2 = 0, \quad (7.23)$$

полученным из условия покомпонентного материального баланса. Здесь $Pe = Lv/D$ — число Пекле; L — длина реактора; D — коэффициент продольного перемешивания; K — константа скорости реакции; v — скорость подачи реагентов; l — безразмерная координата длины, принимающая значения от 0 до 1.

Граничные условия можно записать в виде

$$l = 0, \quad x_H = x(0) - \frac{1}{Pe} \frac{dx(0)}{dl}; \quad l = 1, \quad \frac{dx(1)}{dl} = 0, \quad (7.24)$$

где x_H — концентрация исходного реагента; $x(0)$ — на входе в реактор.

Уравнение (7.23) представляет собой нелинейное дифференциальное уравнение второго порядка с граничными условиями и с постоянными коэффициентами. Решение таких уравнений представляет определенные трудности вследствие плохой сходимости, сильно зависящей от значений коэффициентов.

Для решения уравнения (7.23) воспользуемся методом квазилинеаризации [19]. Предположим, что имеется некоторое решение (начальное приближение) x_n , и разложим уравнение (7.23) в окрестности этого решения в ряд Тейлора до членов первого порядка включительно, предварительно разре-

шив его относительно второй производной, т. е. записав в виде

$$\frac{1}{P_0} \frac{d^2 x}{dt^2} = x + Cx^3 = f(t, x). \quad (7.24)$$

Тогда имеем

$$\begin{aligned} \frac{1}{P_0} \frac{d^2 x_{n+1}}{dt^2} &= f(t_n, x_n) + (t_{n+1} - t_n) \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial t_n} + \\ &+ (x_{n+1} - x_n) \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial x_n} = x_n + Cx_n^3 + (t_{n+1} - t_n) + \\ &+ (x_{n+1} - x_n) 2Cx_n = x_{n+1} + 2Cx_n x_{n+1} - Cx_n^3, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (7.25)$$

Для граничных условий соответственно имеем

$$x_n = x_{n+1}^{(0)} - \frac{1}{P_0} \frac{dx_{n+1}(0)}{dt}, \quad \frac{dx_{n+1}(1)}{dt} = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.26)$$

Воспользовавшись заменой переменных, получим

$$dx_{n+1}/dt = y_{n+1}.$$

Уравнения (7.25); (7.26) окончательно можно записать в виде

$$\frac{1}{P_0} \dot{y}_{n+1} = y_{n+1} + 2Cx_n x_{n+1} - Cx_n^3; \quad (7.27)$$

$$x_n = x_{n+1}(0) - \frac{1}{P_0} y_{n+1}(0); \quad y_{n+1}(1) = 0. \quad (7.28)$$

Таким образом, в результате нами получена система линейных дифференциальных уравнений первого порядка.

В соответствии с теорией линейных дифференциальных уравнений [21] решение систем (7.27), (7.28) можно представить как линейную комбинацию частного и однородных решений, т. е.

$$\begin{aligned} y_{n+1}(t) &= y_{pn+1} + \sum_{i=1}^2 a_{in+1} v_{ih_{n+1}}; \\ x_{n+1}(t) &= x_{pn+1} + \sum_{i=1}^2 a_{in+1} x_{ih_{n+1}} \end{aligned} \quad (7.29)$$

где a_i — константы интегрирования, определяемые из граничных условий. Поскольку ни одно из граничных условий неизвестно, необходимо определить два решения однородной системы уравнений и одно частное. При этом в качестве начальных условий для вычисления этих решений можно выбрать любой ненулевой вектор.

Так, для получения решений однородной системы уравнений

$$\begin{aligned} \dot{x}_{n+1} &= y_{n+1}; \\ \frac{1}{P_0} \dot{y}_{n+1} &= y_{n+1} + 2Cx_n x_{n+1} \end{aligned} \quad (7.30)$$

можно воспользоваться начальными условиями вида

$$\begin{aligned} x_{1h_{n+1}}(0) &= 1; & y_{1h_{n+1}}(0) &= 0; \\ x_{2h_{n+1}}(0) &= 0; & y_{2h_{n+1}}(0) &= 1, \end{aligned} \quad (7.31)$$

Для получения частного решения системы уравнений (7.27) — начальными условиями вида

$$x_{F_{i+1}}(0) = x_{i1}; \quad y_{F_{i+1}}(0) = 0. \quad (7.32)$$

Итак, алгоритм решения уравнения (7.23) заключается в следующем.

1. Исходя из начального приближения $x_0(l)$ и $y_0(l)$ вычисляются решения однородной системы (7.30) с начальными условиями (7.31) и частное решение системы (7.27) с начальными условиями (7.32).

2. В результате решения системы линейных уравнений (7.29) определяются константы интегрирования a_i с использованием граничных условий (7.28) в качестве правых частей.

3. Если два последующих решения не отличаются на заданную величину, то решение заканчивается, в противном случае расчеты повторяются с п. 1, но с использованием полученного решения в качестве начального. Эта процедура повторяется до тех пор, пока не будет достигнута заданная точность.

Заметим, что из каждой итерации в данном случае необходимо три раза решить систему дифференциальных уравнений с тем, чтобы определить коэффициенты a_i . Для интегрирования этой системы можно воспользоваться любым методом, в частности, изложенным выше.

Пример 6. При проектировании ректификационных установок определение таких технологических параметров, как флегмовое число, число тарелок, положение тарелки питания, производится по некоторым критериям путем проведения многократных расчетов с использованием определенной стратегии.

Процесс итеративного поиска этих параметров, как правило, приводит к существенным затратам машинного времени. Решение этой задачи более эффективно с использованием метода квазилинеаризации. В этом случае для описания ректификационной колонны используется система разностных уравнений с граничными условиями, решение которой возможно путем приведения ее к линейному виду и определения частного и однородных решений. При этом одной из переменных является и флегмовое число. Таким образом, удается исключить итерации по флегмовому числу, определяя его совместно с другими переменными задачи [20].

Пусть ректификационная колонна [см. рис. 4.10] имеет N тарелок и снабжена полным конденсатором. Питание в количестве F_1 и F_2 состава $X_{F_{1i}}$ и $X_{F_{2i}}$ ($i = 1, 2, \dots, m$) соответственно поступает из тарелки NF_1 и NF_2 . По одному из компонентов разделяемой смеси, например по первому, требуется обеспечить заданное разделение, т. е.

$$x_i(0) = l; \quad (7.33)$$

$$x_i(N) = c. \quad (7.34)$$

Кроме того, с одной из тарелок NF_3 , расположенной выше NF_2 , производится боковой отбор по жидкой фазе в количестве L СН. Предполагается, что потоки пара и жидкости, а также коэффициенты относительной летучести постоянны по высоте колонны.

Запишем систему разностных уравнений материального баланса, условие фазового равновесия и граничные условия.

Уравнения полного и покомпонентного материального баланса колонны:

$$F_1 + F_2 - D - B - LCH = 0; \quad (7.35)$$

$$F_1 x_{F_{1i}} + F_2 x_{F_{2i}} - B x_i(0) - D x_i(N) - LCH x_i(NF_3) = 0. \quad (7.36)$$

Уравнения материального баланса куба колонны:

$$x_i(1) = \frac{V}{L_2} y_i(0) + \frac{B}{L_2} x_i(0); \quad (7.37)$$

шив его относительно второй производной, т. е. записав в виде

$$\frac{1}{P_e} \frac{d^2x}{dl^2} = f + Cx^2 = f(t, x). \quad (7.24)$$

Тогда имеем

$$\begin{aligned} \frac{1}{P_e} \frac{d^2x_{n+1}}{dl^2} &= f(t_n, x_n) + (t_{n+1} - t_n) \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial x_n} + \\ &+ (x_{n+1} - x_n) \frac{\partial f(t_n, x_n)}{\partial x_n} = t_n + Cx_n^2 + (t_{n+1} - t_n) + \\ &+ (x_{n+1} - x_n) 2Cx_n = t_{n+1} + 2Cx_n x_{n+1} - Cx_n^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (7.25)$$

Для граничных условий соответственно имеем

$$x_n = x_{n+1}^{(0)} - \frac{1}{P_e} \frac{dx_{n+1}(0)}{dl}, \quad \frac{dx_{n+1}(1)}{dl} = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.26)$$

Воспользовавшись заменой переменных, получим

$$dx_{n+1}/dl = y_{n+1}.$$

Уравнения (7.25); (7.26) окончательно можно записать в виде

$$\frac{1}{P_e} \dot{y}_{n+1} = y_{n+1} + 2Cx_n x_{n+1} - Cx_n^2; \quad (7.27)$$

$$x_n = x_{n+1}(0) - \frac{1}{P_e} y_{n+1}(0); \quad y_{n+1}(1) = 0. \quad (7.28)$$

Таким образом, в результате нами получена система линейных дифференциальных уравнений первого порядка.

В соответствии с теорией линейных дифференциальных уравнений [21] решение систем (7.27), (7.28) можно представить как линейную комбинацию частного и однородных решений, т. е.

$$y_{n+1}(l) = y_{pn+1} + \sum_{i=1}^1 a_{in+1} y_{ih_{n+1}}; \quad (7.29)$$

$$x_{n+1}(l) = x_{pn+1} + \sum_{i=1}^2 a_{in+1} x_{ih_{n+1}}.$$

где a_i — константы интегрирования, определяемые из граничных условий.

Поскольку ни одно из граничных условий неизвестно, необходимо определить два решения однородной системы уравнений и одно частное. При этом в качестве начальных условий для вычисления этих решений можно выбрать любой ненулевой вектор.

Так, для получения решений однородной системы уравнений

$$\dot{x}_{n+1} = y_{n+1};$$

$$\frac{1}{P_e} \dot{y}_{n+1} = y_{n+1} + 2Cx_n x_{n+1} \quad (7.30)$$

можно воспользоваться начальными условиями вида

$$x_{1h_{n+1}}(0) = 1; \quad y_{1h_{n+1}}(0) = 0;$$

$$x_{2h_{n+1}}(0) = 0; \quad y_{2h_{n+1}}(0) = 1, \quad (7.31)$$

для получения частного решения системы уравнений (7.27) — начальными условиями вида

$$x_{rn+1}(0) = x_H; \quad y_{rn+1}(0) = 0. \quad (7.32)$$

Итак, алгоритм решения уравнения (7.23) заключается в следующем.

1. Исходя из начального приближения $x_0(l)$ и $y_0(l)$ вычисляются решения однородной системы (7.30) с начальными условиями (7.31) и частное решение системы (7.27) с начальными условиями (7.32).

2. В результате решения системы линейных уравнений (7.29) определяются константы интегрирования a_i с использованием граничных условий (7.28) в качестве правых частей.

3. Если два последующих решения не отличаются на заданную величину, то решение заканчивается, в противном случае расчеты повторяются с п. 1, но с использованием полученного решения в качестве начального. Эта процедура повторяется до тех пор, пока не будет достигнута заданная точность.

Заметим, что из каждой итерации в данном случае необходимо три раза решить систему дифференциальных уравнений с тем, чтобы определить коэффициенты a_i . Для интегрирования этой системы можно воспользоваться любым методом, в частности, изложенным выше.

Приме 6. При проектировании ректификационных установок определение таких технологических параметров, как флегмовое число, число тарелок, положение тарелки питания, производится по некоторым критериям путем проведения многократных расчетов с использованием определенной стратегии.

Процесс итеративного поиска этих параметров, как правило, приводит к существенным затратам машинного времени. Решение этой задачи более эффективно с использованием метода квазилинеаризации. В этом случае для описания ректификационной колонны используется система разностных уравнений с граничными условиями, решение которой возможно путем приращения ее к линейному виду и определения частного и однородных решений. При этом одной из переменных является и флегмовое число. Таким образом, удается исключить итерации по флегмовому числу, определяя его совместно с другими переменными задачи [20].

Пусть ректификационная колонна [см. рис. 4.10] имеет N тарелок и снабжена полным конденсатором. Питание в количестве F_1 и F_2 состава $X_{F_{1i}}$ и $X_{F_{2i}}$ ($i = 1, 2, \dots, m$) соответственно поступает из тарелки NF_1 и NF_2 . По одному из компонентов разделяемой смеси, например по первому, требуется обеспечить заданное разделение, т. е.

$$x_i(0) = l; \quad (7.33)$$

$$x_i(N) = c. \quad (7.34)$$

Кроме того, с одной из тарелок NF_3 , расположенной выше NF_2 , производится боковой отбор по жидкой фазе в количестве L СН. Предполагается, что потоки пара и жидкости, а также коэффициенты относительной летучести постоянны по высоте колонны.

Запишем систему разностных уравнений материального баланса, условие фазового равновесия и граничные условия.

$$\text{Уравнения полного и покомпонентного материального баланса колонны:} \\ F_1 + F_2 - D - B - LCH = 0; \quad (7.35)$$

$$F_1 x_{F_{1i}} + F_2 x_{F_{2i}} - B x_i(0) - D x_i(N) - LCH x_i(NF_3) = 0. \quad (7.36)$$

Уравнения материального баланса куба колонны:

$$x_i(1) = \frac{V}{L_2} y_i(0) + \frac{B}{L_2} x_i(0); \quad (7.37)$$

отпарной части колонны:

$$x_i(n+1) = x_i(n) + \frac{V}{L_2} (y_i(n) - y_i(n-1)); \quad (7.38)$$

тарелки питания:

$$x_i(n+1) = \frac{V}{L_1} y_i(n) - \frac{L_2}{L_1} x_i(n) - \frac{V}{L_1} y_i(n-1) - \frac{F_1 x_{F1i}}{L_1}; \quad (7.39)$$

$$x_i(n+1) = \frac{V}{L} y_i(n) - \frac{L_1}{L} x_i(n) - \frac{V}{L} y_i(n-1) - \frac{F_2 x_{F2i}}{L}; \quad (7.40)$$

$$n = NF_1, NF_2$$

укрепляющей части колонны:

$$x_i(n+1) = x_i(n) + \frac{V}{L_0} (y_i(n) - y_i(n-1)), \quad n = NF_1 + 1, \dots, NF_2 - 1 \quad (7.41)$$

$$x_i(n+1) = \frac{V}{L} (y_i(n) - y_i(n-1)) + x_i(n), \quad i = 1, 2, \dots, m; \quad n = NF_2 + 1, \dots, N. \quad (7.42)$$

Условие фазового равновесия имеет вид

$$y_i(n) = \alpha_i x_i(n) / \sum_{i=1}^m \alpha_i x_i(n). \quad (7.43)$$

Обозначим $V/L = Z$. Для переменной Z справедливо уравнение

$$Z(n) = Z(n-1). \quad (7.44)$$

Здесь L, x, V, y, D, B, α — количество и состав жидкой и паровой фаз, количество дистиллята и кубового остатка и коэффициент относительной летучести соответственно.

Уравнения (7.37) — (7.44) составляют исходную систему нелинейных разностных уравнений первого порядка. Эта система содержит $2m + 1$ неизвестных. Количество кубового продукта и дистиллята определяется исходя из заданных условий разделения и уравнений полного и покомпонентного баланса (для $i = 1$) колонны при заданном начальном профиле концентраций по высоте колонны. Подстановкой выражений (7.43) в уравнения (7.37) — (7.44) исходную систему уравнений можно сократить до $m + 1$ порядка с $m + 1$ неизвестными ($x^i, i = 1, 2, \dots, m, Z$). Очевидно для решения этой системы уравнений необходимо иметь $m + 1$ граничное условие. Такими граничными условиями являются уравнения (7.33) — (7.36).

Для приведения к линейному виду разложим уравнения (7.36) — (7.42) и (7.44) в ряд Тейлора по аналогии с формулой (7.25). Тогда после соответствующих преобразований можно записать

$$x_{ik+1}(n+1) = x_{ik+1}(n) + \frac{[D^2 - D(F_1 + F_2 - LCH)] [Z_{k+1}(n) - Z_k(n)]}{[D + (F_1 + F_2 - LCH) (Z_k(n) - 1)]^2} \times$$

$$\times \left(\frac{\alpha_i x_{ik}(n)}{\sum_{i=1}^m \alpha_i x_{ik}(n-1)} - \frac{\alpha_i x_{ik}(n-1)}{\sum_{i=1}^m \alpha_i x_{ik}(n-1)} \right) +$$

$$+ \frac{DZ_k(n)}{D + (F_1 + F_2 - LCH) (Z_k(n) - 1)} \times$$

$$\times \left(\frac{\alpha_i x_{ik+1}(n)}{\sum_{i=1}^m \alpha_i x_{ik}(n)} - \frac{\alpha_i x_{ik}(n)}{[\sum_{i=1}^m \alpha_i x_{ik}(n)]^2} \right) \sum_{i=1}^m \alpha_i [x_{i+1}(n) - x_{ik}(n)] +$$

$$+ \frac{\alpha_i x_{ik}(n-1) \sum_{i=1}^m \alpha_i [x_{i+1}(n-1) - x_{ik}(n-1)]}{[\sum_{i=1}^m \alpha_i x_{ik}(n-1)]^2} - \frac{\alpha_i x_{ik}(n-1)}{\sum_{i=1}^m \alpha_i x_{ik}(n-1)}, \quad (7.45)$$

$$Z_{k+1}(n) = Z_{k+1}(n-1). \quad (7.46)$$

Здесь неизвестными являются переменные с индексом $k + 1$, а величины с индексом k получены на предыдущей итерации.

Для решения линейной системы разностных уравнений первого порядка можно воспользоваться формулами (7.29), т. е. искать его как комбинацию частного и однородных решений. При этом константы i определяются в результате решения системы линейных уравнений, образованной граничными условиями (7.33) — (7.36). Хотя количество дистиллята — переменная величина, определяемая в процессе расчета, для каждой последующей итерации эта величина является константой, вычисленной по результатам предыдущей итерации. Для этого необходимо решать на каждой итерации уравнение с одной неизвестной, например, методом Вегстейпа. Этим самым удается свести задачу поиска коэффициентов α_i к решению системы линейных алгебраических уравнений. Заметим, что в формулах (7.29) конечное значение индексов суммирования равно количеству недостающих начальных условий.

Для получения частного и однородного решений в общем случае можно использовать любые линейно независимые ненулевые векторы. Например, для $m = 4$ начальными условиями могут быть

$$x_{1p}(0) = 1;$$

$$x_{2h1}(0) = x_{2h2}(0) = x_{4h3}(0) = Z_{h4} = 1.$$

Все остальные начальные условия равны нулю.

Таким образом, алгоритм расчета колонны в проектной постановке заключается в следующем.

1. Исходя из некоторого начального профиля концентраций по жидкой фазе и начальных значений Z и D находятся частное и однородные решения системы уравнений (7.45) и (7.46).

2. Эти решения совместно с граничными условиями используются для определения коэффициентов α_i , а затем для нахождения решения по формулам (7.29).

3. Если решение не удовлетворяет условиям окончания, то полученные значения переменных x_{ij}, Z и D используются в качестве нового приближения и расчет повторяется с п. 1.

Флегмовое число вычисляется по соотношению

$$R = \frac{L}{D} = \frac{L}{V-D} = \frac{1}{V/L-1} = \frac{1}{Z-1}.$$

Пример 7. Метод квазилинеаризации можно использовать также и для оценки параметров дифференциальных уравнений. Предположим, что в уравнении (7.23) параметры P_e и C являются неизвестными величинами и их значения необходимо определить по экспериментальным значениям концентрации реагента A , замеренной по длине реактора в некоторых дискретных

точках, т. е. по значениям

$$x_{i \text{ эксл}} = b_i, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (7.47)$$

Математически вычисление параметров Pe и C формулируется как решение многоточечной граничной задачи. Поскольку эти параметры являются частью дифференциального уравнения, их определение возможно лишь при наличии аналитического решения уравнения (7.23а). При отсутствии же такого решения можно получить с помощью метода квазилинеаризации.

Для этого будем рассматривать параметры Pe и C как функции независимой переменной l наряду с x . Тогда уравнение (7.23а) можно записать в виде

$$d^2x/dl^2 = Pe \cdot l + Pe C x^2 = f(l, x, Pe, C). \quad (7.48)$$

Используя разложение функции в ряд по аналогии с примером 1, получим

$$\begin{aligned} x_{n+1} &= \bar{y}_{n+1}, \\ y_{n+1} &= Pe_n y_{n+1} + 2Pe_n x_n x_{n+1} C_n + Pe_n x_n^2 C_{n+1} + \\ &+ y_n + C_n x_n^2 Pe_{n+1} - 3Pe_n C_n x_n^2 + Pe_n y_n; \\ Pe_{n+1} &= 0; \\ C_{n+1} &= 0 \end{aligned} \quad (7.49)$$

с граничными условиями

$$x_n = x_{n+1}(0) - \frac{y_{n+1}(0)}{Pe_{n+1}}, \quad y_{n+1}(1) = 0. \quad (7.50)$$

Поскольку не задано ни одно начальное условие в явной форме, для получения решения системы (7.49) необходимо вычислить одно частное и четыре однородных решений, т. е. система (7.29) будет содержать четыре линейных алгебраических уравнения с четырьмя неизвестными коэффициентами a_i . Следовательно, необходимо иметь четыре граничных условия, чтобы решить эту систему. Два граничных условия заданы уравнениями (7.50), а в качестве двух других можно использовать экспериментальные значения $x_{1 \text{ эксл}}$ и $x_{2 \text{ эксл}}$ или получить их в результате минимизации выражения

$$\sum_{i=1}^m (x_{i \text{ расч}} - x_{i \text{ эксл}})^2. \quad (7.51)$$

Алгоритм решения системы уравнений (7.49), за исключением поиска недостающих граничных условий минимизацией (7.51), аналогичен рассмотренному в примере 1.

Рассмотренные примеры иллюстрируют возможность объединения различных по характеру задач химической технологии в рамках одного численного метода. Использование метода далеко не ограничивается приведенными примерами. Обоснование его эффективности и применение для решения других задач можно найти в [19]. Можно сказать, что использование в определенных рамках универсального метода позволяет создавать пакеты программ, достоинством которых является общность математического аппарата и отсюда, как следствие, возможность более тщательной обработки на единой методологической основе.

Проблемно-ориентированные пакеты прикладных программ. Эти пакеты характеризуются специализацией и регулярностью

применения. В отличие от методо-ориентированных пакетов их назначением является решение определенной проблемы или родственных проблем, а не применение метода. Специфика областей применения проблемно-ориентированных пакетов обычно отражается в структуре связей отдельных модулей, их номенклатурой и являющейся ограничением на пути универсального применения используемых методов. К тому же компетентность разработчика в конкретной области применения часто определяет эффективность проблемно-ориентированного пакета.

Разработка проблемно-ориентированных пакетов программ экономически целесообразна в том случае, если гарантировано их регулярное использование и важность проблемы не вызывает сомнений, а их эффективность в значительной степени определяется согласованностью с техническими средствами. Вопрос экономической целесообразности разработки возникает в связи с ориентацией на широкого пользователя и, следовательно, с необходимостью более тщательной отработки алгоритмов и средств взаимодействия. Если методо-ориентированные пакеты всякий раз настраиваются на решение конкретной задачи высококвалифицированными специалистами в области вычислительной техники и программирования, находясь в эксплуатации с постоянными доработками и изменениями, то проблемно-ориентированные пакеты предназначены для эксплуатации специалистами, обладающими ограниченными знаниями средств вычислительной техники. Поэтому многовариантность постановки задачи (или задач) должна быть предусмотрена на этапе их разработки. Для простоты эксплуатации пользователя желательно освободить от необходимости программирования. Он должен знать проблему и возможность системы для ее решения.

Основой для создания проблемно-ориентированных пакетов могут служить методо-ориентированные пакеты. При этом ориентация метода на решение ограниченного класса проблем, конечно, сужает его возможности, но вместе с тем способствует более тщательной проработке алгоритмов. Имея ограниченный класс задач, легче более детально исследовать алгоритмы и исключить возможные ситуации отказа или предусмотреть соответствующие действия пользователя.

Не следует думать, что проблемно-ориентированные пакеты программ есть нечто завершенное и неизменное. Их компонентами являются отдельные методы, чаще всего инвариантные к решаемым проблемам, выбранные, например, исходя из требований точности, быстродействия и объединенные единым функциональным назначением. Особенность состоит в специализации и большей степени автоматизации вычислительного процесса по сравнению с методо-ориентированными пакетами. Модульный принцип построения пакета позволяет легко расширять и изменять его функции по мере накопления знаний о процессе. Выполнение пакета производится под управлением организующей программы и в зависимости от

задания (проблемы) рабочая программа может формироваться из различных компонент математического обеспечения ЭВМ.

Пакеты прикладных программ с ориентацией на проблему являются средством повышения эффективности решения прикладных задач в различных областях народного хозяйства. Их создание базируется на стремлении объединить в единое целое достижения в области решаемой проблемы, вычислительной математики и вычислительной техники. Конечным результатом разработки является программно-аппаратный комплекс, позволяющий пользователю с желаемой точностью, максимальной простотой и удобством решать появляющиеся в процессе его деятельности проблемы. Очевидно, создание таких пакетов — задача не только сложная в смысле формулирования и описания проблемы, разработки и обходных алгоритмов, но и трудоемкая. Для ее решения обычно привлекаются специалисты различных профилей — технологи, математики, программисты. Кроме того, в зависимости от сложности проблемы последняя может быть разделена на отдельные подпроблемы, каждая из которых решается самостоятельно в рамках общей цели. Такое разделение на подпроблемы обычно производится исходя из специфики отдельной части общей задачи. При наличии структурной или функциональной организованности алгоритмов части проблемы она может выступать в качестве подсистемы. При моделировании реакторных процессов, например, в качестве отдельных частей можно выделить установление механизма реакции, оценку кинетических констант, модель реактора и т. д. Помимо относительной независимости этих частей можно было бы выделить их и исходя из последовательности использования в процессе моделирования реактора.

Сложность решаемой проблемы определяет и функциональную структуру системы. Поэтому система может содержать отдельные методо-ориентированные пакеты в качестве подсистем, ограничивая, вероятнее всего, их функции определенным классом задач. Например, пакет программ статистического анализа используется всякий раз, когда появляется необходимость в обработке экспериментальных данных, при определении и коррекции параметров стохастических моделей. Однако его использование ограничивается вопросами данной проблемы. Поэтому включение отдельных пакетов в качестве подсистем связано с решением ряда организационных вопросов. Это прежде всего вопрос полноты использования его возможностей и, следовательно, целесообразности выделения обычно большого объема памяти и снижения быстродействия. Может оказаться, что выгоднее специально разработать такую подсистему, исходя из конкретных требований общей проблемы, нежели частично использовать возможности готовой системы более широкого назначения. Это обеспечит компактность и быстродействие программы. Последнее обстоятельство является причиной того, что системы не часто строятся на основе методо-ориентированных

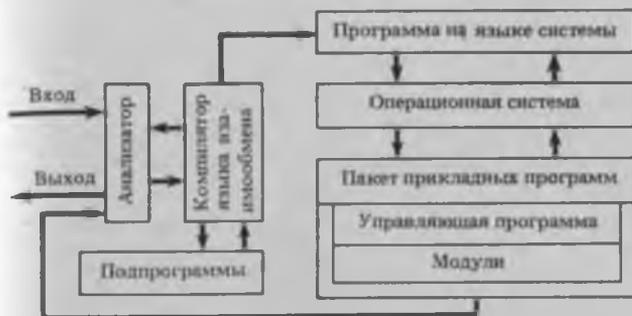


Рис. 7.5. Структурная схема прикладной системы

романных пакетов. Разнообразие решаемых в рамках проблемы задач приводит к разнообразию используемых методов, которые применяются узкоспециализировано и потому достаточно эффективно.

Объединение подсистем в общую систему возможно лишь при совместности их, например, по языку программирования, вычислительным средствам и т. д. Отдельные подсистемы разрабатывались различными программистами и в разное время. Для разработок старых (ЭВМ первого и второго поколений) такое объединение крайне затруднено, так как программы создавались применительно к имеющемуся типу ЭВМ с максимальным использованием возможностей и особенностей последних. Использование таких программ сопряжено с существенными переработками, по затратам труда сравнимыми с созданием новых. Для ЕС ЭВМ и СМ ЭВМ вопрос языковой совместности решается на уровне операционной системы. Поэтому как отдельные модули, так и подсистемы могут разрабатываться на различных языках и в дальнейшем объединяться в рамках операционной системы. Более того, при разработке модулей рекомендовано придерживаться требований ГОСТа [22]. Практика эксплуатации ЭВМ и разработки систем показывает, однако, что целесообразнее все же использовать какой-либо один развитый язык программирования для системы. Это упрощает не только разработку системы, но и ее эксплуатацию.

На рис. 7.5 приведена функциональная структура системы, обладающей языком взаимообмена высокого уровня. Входная информация (алфавитная или цифровая) воспринимается анализатором информации, выполняющим функции синтаксического контроля и этапы лексического, синтаксического и семантического анализа. Поскольку она записана на специализированном языке, отличном от языка системы, то в дальнейшем преобразуется компилятором на базовый язык системы и воспринимается непосредственно операционной системой ЭВМ. Выходная информация мо-

жет внутренние представляться в кодированном виде, поэтому перед поступлением в распоряжение пользователя проходит этап декодирования.

Общей тенденцией, свойственной пакетам прикладных программ, является стремление к все большей автоматизации вычислительного процесса, упрощающего эксплуатацию. Однако неизбежно приводит к усложнению логической структуры.

Рассмотренная классификация пакетов прикладных программ не является абсолютной, поскольку отдельные пакеты могут обладать характеристиками как тех, так и других. В практике моделирования химико-технологических производств получили распространение пакеты программ, ориентированные на решение широкого класса задач, своего рода универсальные моделирующие системы. Характерной чертой их является незамкнутость, т.е. возможность расширения при решении конкретной задачи путем введения модулей недостающих элементов и определения последовательности расчета на базовом языке программирования пакета или некоторой его надстройке. Обычно пользователь активно участвует в процессе решения, изменяя последовательность вычислений или задавая другой набор модулей. По организации функционирования такие пакеты приближаются к методо-ориентированным, однако по составу математического обеспечения — к пакетам ориентированным на проблему. Несмотря на широкие возможности в постановке задач, необходимость программирования сужает круг возможных их пользователей.

7.3. Математические модели типовых процессов химической технологии

Ранее отмечалось (см. гл. 4), что основу САПР составляют математические модели элементов, составляющих технологическую схему. Модели могут быть различными по точности, математическому описанию и способу представления. Это либо модели, основанные на уравнениях баланса и фундаментальных закономерностях процессов, либо соответствующие их аппроксимации в виде некоторого приближения. Очевидно, при проектировании желательны иметь модели, обладающие прогнозирующими свойствами (допускающими экстраполирование основных характеристик процесса). Такие модели достаточно сложны, и при их разработке широко используется модульный принцип (на основе различных способов доказательного программирования). Предметная область (или знания об отдельных процессах) обычно включает несколько важных аспектов, которые могут быть описаны различными способами и с различной точностью. Поэтому и модели отдельных процессов могут содержать набор модулей, соответствующих различным уровням иерархии описания процесса. Ясно, что такой набор модулей должен быть некоторым образом упорядочен. Положительным мо-

ментом в такой ситуации является то, что отдельные явления при-
сущи группе процессов (например, фазовое равновесие, расслаива-
ние жидких фаз и т. д.), и поэтому соответствующие модули
будут одинаковыми.

В этом разделе приведены математическое описание и соответ-
ствующие алгоритмы для расчета стационарных режимов отдель-
ных типовых процессов, в основе которых лежат закономерности
(при наличии тех или иных допущений), рассмотренные в гл. 4.

7.3.1. Алгоритмы расчета гетерогенных жидкофазных систем

В зависимости от природы веществ компоненты смеси могут об-
ладать ограниченной взаимной растворимостью, образуя, таким
образом, отдельные фазы многокомпонентной системы. В простей-
шем случае при смешении жидкостей образуются две фазы, в каж-
дой из которых содержатся отдельные компоненты органического
и неорганического происхождения. Иногда такие системы обра-
зуются искусственно путем добавления компонента, склонного
к избирательному растворению. Добавление такого компонента
(разделяющего агента) изменяет условия фазового равновесия
системы, увеличивая движущую силу процесса, и позволяет при-
менить специальный метод для разделения компонентов исходной
смеси. Часто введение разделяющего агента в исходную смесь
обуславливается не столько близостью свойств компонентов, а
склонностью к разложению, полимеризации и т. п. при высоких
температурах.

Взаимная растворимость компонентов является функцией тем-
пературы. Поскольку концентрация насыщенного раствора одно-
го из компонентов в другом с повышением температуры обычно
возрастает, то область расслаивания при нагревании будет умень-
шаться и может исчезнуть вовсе. Важным выводом из этого, имею-
щим практическое значение при разделении расслаивающихся сис-
тем, является то, что, например, при ректификации по высоте
колонны область расслаивания будет изменяться, достигая в от-
дельных точках максимальной величины. Последнее обстоятель-
ство может быть использовано для повышения эффективности
разделения.

Способность смесей к расслаиванию широко используется не
только как самостоятельный способ разделения смесей (например,
в гравитационных декантаторах, экстракторах), но и в совокуп-
ности с другими процессами. Для этого способа характерны низкие
капитальные и эксплуатационные затраты непосредственно на
процесс, особенно если разделяющий агент легко регенерируется.
Однако, несмотря на широкое распространение, до сих пор отсут-
ствуют достаточно обоснованные модели как выбора разделяю-
щих агентов, так и расчета процесса расслаивания. Большей
частью модели основаны на обработке экспериментальных данных

и полуэмпирических зависимостях. В связи с повышением экстракции и азеотропно-экстрактивной ректификации как энергоемких процессов разделения, возрастает важность исследований в этой области.

Расчет процессов расслаивания жидких систем включает основных этапа: установление факта наличия многофазности и ределение характеристик процесса расслаивания. Первый связан с расчетом фазового равновесия, а второй — с определением параметров режима и времени пребывания жидкости в аппарате. Эти вопросы рассмотрены ниже и предложены соответствующие модели для расчета равновесных составов и гравитационных декантаторов.

Выбор разделяющего агента. Разделяющий агент выбирается в соответствии с требованиями общего характера (легкость регенерации, дешевизна и др.) и основан на термодинамических соотношениях, выражающих среднее увеличение коэффициента относительной летучести компонента за счет присутствия разделяющего агента [23, 24]. Известные методы выбора можно разделить на две группы: методы, основанные на использовании данных о свойствах растворов, образуемых компонентами заданной смеси и разделяющим агентом; методы, основанные на данных по свойствам компонентов.

К первой группе относятся методы выбора по данным о равновесии между жидкостью и паром, температурах кипения смеси, растворимости компонентов, свойствам азеотропных смесей [23], молярных теплотах смешения жидкостей и испарения компонентов [25]. Поскольку методы связаны с экспериментальными исследованиями, их эффективность зависит от опыта и интуиции экспериментатора.

Отличительной особенностью методов второй группы является попытка установить связь степени неидеальности свойств компонентов смеси с каким-нибудь одним свойством или одним видом межмолекулярного взаимодействия. Такой подход дает полезные результаты в тех случаях, если компоненты смеси сильно различаются по химическому строению и свойствам. В более сложных случаях необходимо учитывать различные составляющие межмолекулярного взаимодействия.

Так, предложено проводить выбор разделяющего агента на основе величины дипольного момента, способности образования водородной связи, протонной силы молекулы [26, 27].

Наряду с методами выбора, основанными на свойствах образуемых растворов и компонентов, составляющих смесь, широкое распространение имеет непосредственный экспериментальный подбор разделяющего агента. Экспериментальное определение разделяющего агента является наиболее точным, однако и наиболее трудоемким. Если в определенном классе соединений, например соединениях гомологического ряда, выявлены закономерности, то

общем случае таковые отсутствуют и выбор разделяющего агента представляется самостоятельной задачей со свойственными ей этапами расчетного и экспериментального исследования.

Наиболее удачным в реализации является метод, основанный на оценке величины коэффициента относительной летучести в присутствии различных растворителей по методу функциональных групп [28]. Коэффициент относительной летучести компонента является функцией состава. И эта зависимость выражается через отношение коэффициентов активности, поскольку отношение давления паров чистых компонентов практически является константой (не зависит от состава и слабо зависит от температуры):

$$\alpha = \frac{P_1^0}{P_2^0} \frac{\gamma_{1s}}{\gamma_{2s}} \quad (7.52)$$

Поскольку коэффициенты активности являются функцией состава, эта зависимость, особенно от концентрации разделяющего агента, должна быть известна. Для выбора удачного разделяющего агента желательно, чтобы его концентрация была высокой, а это означает, что исследуемый раствор будет сильно разбавленным относительно разделяемых компонентов. Тогда для параметра, определяющего селективность растворителя, можно записать

$$S = \gamma_{1s}^{\infty} / \gamma_{2s}^{\infty} \quad (7.53)$$

Здесь важно с точки зрения вычислений, что расчетные формулы метода UNIFAC существенно упрощаются для бесконечно разбавленных растворов [28]. Алгоритм выбора разделяющего агента на основе метода функциональных групп приведен на рис. 7.6. В табл. 7.1 приведены результаты сравнения расчетных и экспериментальных значений селективности при различных разделяющих агентах для системы бензол-циклогексан.

Таблица 7.1

Растворитель	$t_{\text{кип}}, ^\circ\text{C}$	Расчет			Эксперимент 1,8
		γ_{1s}^{∞}	γ_{2s}^{∞}	$1/S^{\infty}$	
Анилин	184	1,74	5,18	2,98	2,16 при 66,8 мол. % и 93° С
Нитробензол	211	1,43	4,70	3,29	2,32 при 68,2 мол. % и 102° С
Фенол	182	1,93	2,69	1,39	2,06 при 66,8 мол. % и 92° С

Примечание. Расчетные данные получены для 70° С.

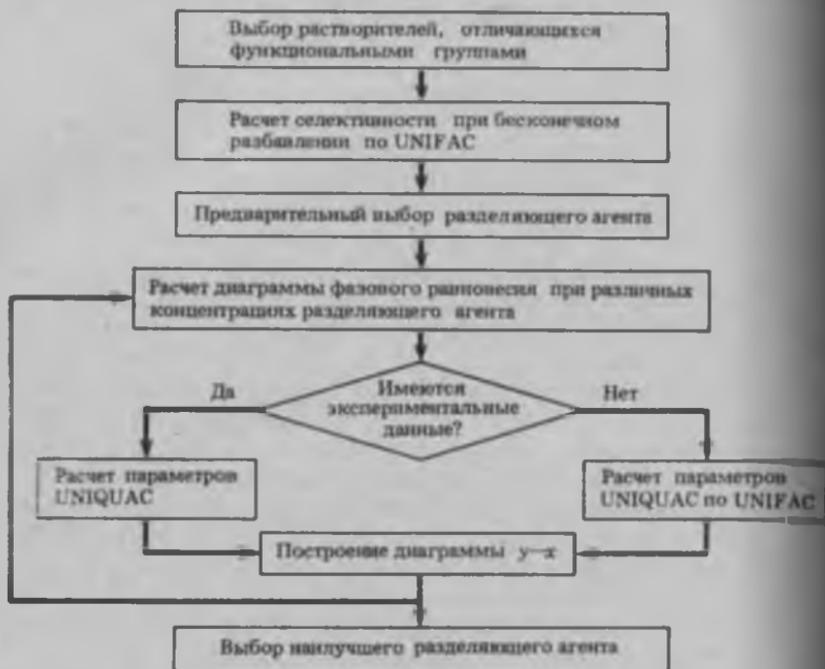


Рис. 7.6. Алгоритм выбора разделяющего агента

Кинетика расслаивания жидкофазных систем. В связи с пространственностью многофазных систем большое внимание уделяется разработке теории их движения, причем в последнее время наблюдается бурное развитие этой области знаний. Обзор многочисленных работ, посвященных этой теме, изложен в [23, 24—26]. Сложность общего математического описания заставляет при решении конкретных задач делать те или иные допущения, вносящие определенные погрешности в решение задачи. Так, во многих случаях течение двухфазной системы может рассматриваться как ползущее, т. е. числа Рейнольдса, рассчитанные по диаметру частиц, очень малы (седиментация тонких эмульсий, суспензий и т. д.). Тогда возможна линеаризация уравнения Навье—Стокса, если пренебречь инерционными членами. Такое допущение справедливо и в случае, когда течение смеси в целом по отношению к внешним границам характеризуется большими числами Рейнольдса, тем не менее можно говорить о малости чисел Рейнольдса для движения частиц относительно сплошной фазы. Кроме того, инерционные эффекты менее существенны в системах, состоящих из группы частиц в органической жидкой среде.

Движение систем с концентрацией дисперсной фазы более 2—5% характеризуется возникновением стесненности, проявляющейся

сходя вследствие вязких взаимодействий частиц друг с другом. При экспериментальном исследовании осаждения ансамблей частиц данные интерпретируются обычно в виде отношения скорости стесненного осаждения к скорости осаждения одиночных частиц как функции объемной концентрации частиц, формы частиц, распределения по размерам и числа Рейнольдса [29, 30]

$$u/u_0 = 1/(1 + K\varphi^\beta), \quad (7.54)$$

где значения коэффициента K изменяются в пределах $1,5 \div 2$, а $\beta = 1/3 \div 1$.

Подобные методы описания, справедливые для ползущего течения, позволяют лишь приближенно учесть явления стесненности и влияния стенок аппарата. При описании двухфазных потоков в процессах азеотропно-экстрактивной ректификации в большинстве случаев можно сделать допущение о ползущем режиме движения. Поэтому уравнения вида (7.54) могут быть применены с известной степенью точности для расчета скорости расслаивания жидких смесей. В случае потоков с большими числами Рейнольдса погрешности существенно возрастают.

В последнее время широкое распространение получают методы механики сплошных сред для описания движения многофазных систем. В этом случае каждая фаза рассматривается как сплошная среда, характеризуемая полем скоростей и давления внутри нее. Вся система представляется в виде многоскоростного континуума взаимопроникающих сплошных сред. Тогда описание движения многофазной системы сводится к заданию условий совместного движения фаз и определению величин, описывающих межфазные взаимодействия. В [31] дается обзор работ, посвященных применению методов механики сплошных сред к многофазным системам, а в [8] приведено их дальнейшее развитие на системы, внутри которых происходит обмен энергией, импульсом и массой, а также на системы, в которых протекают химические реакции. Несмотря на всеобъемлющий характер такого подхода, он остается в большей степени теоретическим, так как предлагаемые математические описания трудно применимы при расчете реальных процессов в силу незамкнутости описания и трудностей вычислительного характера. В свою очередь, например, описание межфазного взаимодействия, поля скоростей и давлений невозможно без упрощающих допущений и проведения экспериментальных исследований. Поэтому основным подходом к описанию движения многофазных систем является получение полумпирических соотношений для учета влияния важнейших параметров исходя из общих теоретических закономерностей.

При исследовании жидкофазных систем важнейшей задачей является анализ явлений, происходящих на границе раздела фаз. Это прежде всего процессы коалесценции и дробления капель, влияние поверхностно-активных веществ. Можно выделить два

вида коалесценции: капля—поверхность раздела и капля—капля. Наиболее изученным является первый, однако в основе их, по вероятности, должен лежать в значительной степени общий механизм — это утончение и разрыв пленки сплошной фазы и последующий перенос капли через поверхность раздела фаз.

В настоящее время разработано достаточное количество моделей коалесценции капли у поверхности раздела фаз жидкость—жидкость. Уравнения моделей выводятся на основе макроскопических балансов массы, силы и энергии и уравнений изменения микроскопических объемов жидкости и изменения поверхности раздела фаз. Граничные условия и выражения для потока вместе с уравнениями состояния позволяют замкнуть систему уравнений для данной физической ситуации. Однако обобщенная полная система уравнений сложна для решения. Поэтому используются приближенные аппроксимирующие решения различной точности является наиболее распространенным методом. К сравнительно простым моделям можно отнести модели жесткой капли и жесткой поверхности раздела [32] и модели с учетом деформации капли и поверхности раздела с образованием углубления в центре капли [33, 34]. В [35] показано, что модели коалесценции, основанные на представлении однородной пленки, отделяющей каплю от поверхности, приводят к степенной зависимости времени коалесценции капли, пропорциональной пятой степени эквивалентного диаметра. Эти модели отрицают влияние разности давлений, возникающих вследствие искривления пленки, и поэтому дают завышенные значения показателя степени.

В основе модели параллель — диск лежит предположение о неподвижных поверхностях раздела и постоянном, независимом от радиуса расстоянии между ними. При указанных допущениях для времени коалесценции получено следующее выражение:

$$t_2 - t_1 = \left(\frac{H}{R} \right) \frac{\mu_c \Delta \rho g b^3}{\sigma_i^2} \left(\frac{1}{\delta_2^2} - \frac{1}{\delta_1^2} \right), \quad (7.55)$$

где δ_1 и δ_2 — толщина пленки в моменты времени t_1 и t_2 ; μ_c — вязкость сплошной фазы; σ_i — межфазное натяжение; $\Delta \rho$ — разность плотностей фаз; b — радиус капли.

В модифицированной модели поверхность—диск [36] при изменении подвижности локальных поверхностей раздела для неравномерного утончения пленки в системах толуол—вода и анизол—вода получены выражения

$$t = \frac{3\Phi}{16\pi} \mu_c \frac{A^2}{F} \frac{1}{\delta_c^2}; \quad \frac{A^2}{F} = \frac{\pi}{3} n_G^2 \frac{b^3 \Delta \rho g}{\sigma_i^2}; \quad (7.56)$$

$$\theta = \frac{\Phi n_G^2}{16} \frac{\mu_c \Delta \rho g b^3}{\sigma_i^2} \left[\frac{1}{\delta_c^2} - \frac{1}{\delta_0^2} \right], \quad (7.57)$$

где A — область контакта между поверхностями раздела; F — сила, действующая на поверхности; Φ — параметр, характеризующий число подвижных и неподвижных поверхностей; n_c — геометрический фактор.

Значительно меньшее число работ посвящено исследованию коалесценции капля—капля. Утончение пленки сплошной фазы, разделяющей капли, во многом аналогично утончению пленки между каплей и плоской поверхностью. Процесс утончения пленки между каплями продолжается до тех пор, пока не возникнут достаточно сильные нарушения, вызываемые эффектом Марангони, механической и звуковой вибрацией, электрическими и температурными полями, приводящие к разрыву пленки. Детальный обзор по межфазной коалесценции в жидкой и газовой средах приведен в [37].

Основной целью экспериментальных исследований по межфазной коалесценции было получение соотношения между временем коалесценции, диаметром каплей и физическими свойствами фаз. При моделировании коалесценции капля—капля размещением каплей различных размеров на поверхности жидкости получено соотношение для времени коалесценции в зависимости от диаметра капли a и физических свойств, аналогичное соответствующим уравнениям для коалесценции капля—поверхность раздела фаз:

$$\left(\frac{\tau_i t}{\mu_c a} \right) \approx \left[\frac{a^2 \Delta \rho g_i}{\tau_i} \right]^{0,25} \quad (7.58)$$

Оценка коалесценции капля—поверхность раздела и капля—капля основывается на исследовании процесса утончения разделяющей пленки сплошной фазы. Однако время коалесценции может существенно отличаться от времени утончения пленки. Было обнаружено [36], что для систем с одним и тем же размером каплей и одинаковым временем стекания пленки время коалесценции может существенно различаться. В этом случае возникает вопрос, может ли явление коалесценции интерпретироваться с помощью моделей утончения пленок сплошной фазы? Ряд исследований показывают, что такая оценка обладает следующими недостатками [37]: а) не определена надежность применения этих данных к реальным процессам, таким, как разделение эмульсий; б) неизвестно, насколько применимы данные для систем с заданным уровнем примесей.

Отличие теоретических значений времени коалесценции от экспериментальных частично может быть объяснено трудностью оценки ряда факторов, входящих в модели, и влияющих на коалесценцию. К ним можно отнести влияние начальной и критической толщины пленки; число подвижных и неподвижных поверхностей; влияние размера каплей.

Начальная толщина пленки не имеет глубокого влияния, критическое значение толщины должно быть известно, как граничное условие для оценки времени коалесценции [33]. Интерферометрические измерения критической толщины пленки дают значения от 400 до 1500 Å [38]. Поэтому время коалесценции очень сильно зависит от ее колебаний. Число подвижных и неподвижных поверхностей раздела является устанавливаемым параметром, хотя в настоящее время нет надежного метода учета этого параметра в моделях. Однако использование модели параллель—диск для неравномерного утончения пленки на основе концепции «неподвижности поверхностей» оказалось успешным [36]. Показатели степени в зависимости от времени коалесценции от диаметра капли устанавливаются при выборе той или иной модели. Таким образом, даже качественный учет основных факторов, влияющих на время коалесценции, позволяет корректно описать явление в реальных условиях. Определение параметров, очевидно, должно проводиться по экспериментальным данным.

Исходя из сложной природы механизмов коалесценции представляется интересным связать два вида коалесценции как отношение их времен для оценки фазового разделения в зоне плотной упаковки капель дисперсной фазы в системе жидкость—жидкость. Обычно предполагается, что в дисперсном слое перемешивающие на коалесценцию капля—капля и капля—поверхности раздела, одни и те же для данного размера капель. На этой основе возможно дать теоретические выражения для времен контакта. Так, уравнение для времени стекания пленки в модели жесткая сфера—плоскость записывается [39]

$$t_{d/l} = (t_2 - t_1) = (6\pi\mu_0 b^2/F) \ln(\delta_1/\delta_2). \quad (7.10)$$

Аналогичное уравнение для модели двух жестких сфер имеет вид [40].

$$t_{d/d} = (t_2 - t_1) = (3\pi\mu_0 b^2/F) \ln(\delta_1/\delta_2). \quad (7.11)$$

Из сравнения этих уравнений следует, что отношение $t_{d/d}/t_{d/l}$ равно 0,5, что вполне приемлемо, так как коалесценция капля—капля является частным случаем более общего вида коалесценции капли у поверхности раздела фаз. Величина отношения времен коалесценции может оказаться очень полезной при разработке моделей тонких слоев первичных дисперсий, моделей зон плотной упаковки глубокослойных дисперсий в гравитационных отстойниках, а также в тех случаях, когда эти два типа коалесценции являются конкурирующими процессами. При построении моделей расслаивания необходимо, конечно, учитывать оба вида коалесценции в рамках одного описания.

В процессах азеотропно-экстрактивной ректификации, а также экстракции явление коалесценции важно при моделировании расслаивания, а время коалесценции является основной характерис-

тивной, определяющей как работу, так и размеры требуемого оборудования. Кроме того, при расслаивании жидкой фазы на тарельчатых колоннах коалесценция и дробление капель дисперсной фазы будут определять их размер, что необходимо при расчете массопередачи между фазами.

Разделение гетерофазных продуктов экстрактивной и азеотропной ректификации обычно проводится в гравитационных декантаторах. Этот способ деления отличается экономичностью, простотой обслуживания и находит широкое применение в органической химии.

Наиболее распространенным способом расчета таких аппаратов является исследование свойств двухфазной системы в опытах по периодическому расслаиванию для различных концентраций дисперсной фазы, высоте столба смеси и других параметров. Подробный анализ периодического расслаивания был представлен в работе [40]. На основании экспериментального определения скорости осаждения определялись свойства суспензии, исходя из которых возможно предсказание процесса расслаивания. В основе предложенной методики лежали следующие допущения: система содержит частицы одного размера; скорость осаждения зависит только от концентрации частиц; в процессе осаждения отсутствует агломерация частиц. Распространение этого подхода на непрерывное разделение развито в [41].

Наряду с моделями, основанными на экспериментальном исследовании свойств неоднородных смесей, предложен ряд теоретических моделей. Так, в [42] при рассмотрении монодисперсной системы, в которой отсутствуют взаимодействия между частицами, периодическая седиментация описывается с помощью уравнений сохранения массы и движения для сплошной и дискретной фаз

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_z)}{\partial z} = 0; \quad (7.61)$$

$$\frac{\partial \rho_p}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_p u_p)}{\partial z} = 0; \quad (7.62)$$

$$\frac{\rho_p \partial u_p}{\partial t} + \frac{\rho_p u_p \partial u_p}{\partial z} = -\rho_p \left(1 - \frac{\bar{v}}{v_p}\right) g + \rho_p F(u - u_p) - \frac{\rho_p}{v_p} \frac{\partial p}{\partial z}; \quad (7.63)$$

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\rho u \partial u}{\partial z} + \frac{\rho_p \partial u_p}{\partial t} + \frac{\rho_p u_p \partial u_p}{\partial z} = -\frac{\partial p}{\partial z} - (\rho_p + \rho) g, \quad (7.64)$$

где u , u_p — скорости; z — координата, направленная противоположно ускорению силы тяжести g ; ρ , ρ_p — плотности фаз; p — давление. Эта система уравнений может быть решена только численно относительно распределения концентрации частиц во времени и по высоте сосуда.

В большинстве случаев при седиментации движение потока может рассматриваться ползущим. Поэтому во многих работах для определения скорости движения частиц используются уравнения движения в стоковом приближении. Так, в [43] скорость периодического осаждения $u(t, x, m)$ частиц с учетом вытеснения жидкости вверх определяется выражением

$$u(t, x, m) + \frac{\int_0^M c(t, x, m) u(t, x, m) dm}{1 - c_{\text{sum}}} = u_0(c_{\text{sum}}, M_1, M_2, M_3), \quad (7.65)$$

где u — скорость движения частиц группы m в момент t на расстоянии l ; c_{sum} — суммарная концентрация частиц в единице объема; $c(t, x, m)$ — концентрация частиц; M_1, M_2, M_3 — моменты функции распределения частиц по размерам.

Седиментация реальных систем характеризуется взаимодействием частиц дисперсной фазы, что усложняет значительно их анализ. Особенно это относится к расслаиванию в жидких системах.

Анализ расслаивания жидких смесей при горизонтальном течении рассмотрен в [44]. В основу анализа положено уравнение баланса капель в зоне их плотной упаковки, а также выражение, определяющее скорость коалесценции капель:

$$\frac{3}{\Phi} \frac{d\Phi}{dl} - \frac{1}{n} \frac{dn}{dl} + \frac{4}{\pi} \frac{\eta^*}{\tau^*} \frac{1}{n\Phi^2} = 0; \quad (7.66)$$

$$\frac{dn}{dl} = \frac{1}{\Phi^2} \left(\frac{3}{\pi} \frac{\eta}{\tau} \frac{h}{\Phi} + \frac{4}{\pi} \frac{\eta^*}{\tau} \right), \quad (7.67)$$

где Φ — диаметр капель в дисперсном слое; n — поток капель в дисперсном слое на расстоянии l от входа; h — высота дисперсного слоя; η, η^* — объемная и поверхностная эффективности упаковки. Решение полученных уравнений позволяет определить размеры образующейся зоны плотной упаковки капель в зависимости от расхода смеси, температуры и других параметров.

Аналогичный анализ для случая вертикального движения выполнен в [45]. Высота образующегося слоя плотной упаковки капель здесь определяется также исходя из уравнения баланса капель и скорости коалесценции:

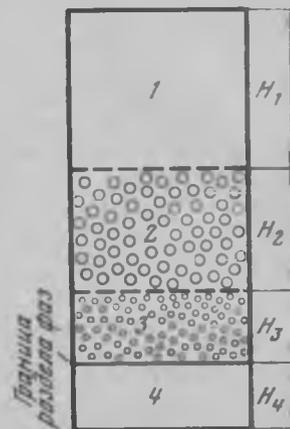
$$\Phi \frac{dn}{dh} + 3n \frac{d\Phi}{dh} = 0; \quad (7.68)$$

$$-\frac{dn}{dh} = \xi \frac{A}{2} \frac{1}{\tau(\Phi)}. \quad (7.69)$$

где A — число соседей вблизи каждой капли; ξ — число капель среднего диаметра Φ в единице объема на расстоянии h от входа; $\tau(\Phi)$ — время коалесценции капель диаметром Φ .

Рис. 7.7. Зонное представление расслаивания эмульсии

1 — зона сплошной фазы; 2 — зона стесненного осаждения; 3 — зона плотной упаковки капель; 4 — зона чистой дисперсной фазы



Основным недостатком рассмотренных моделей является то, что в них не учитывается действительная гидродинамическая картина процесса и факторы взаимодействия частиц. Поэтому их использование приводит к существенным погрешностям по оценке такого параметра, как время расслаивания, определяющего в конечном счете конструкцию аппарата.

С целью более точного определения типоразмеров аппаратов для инерционного расслаивания жидкостей при их проектировании нами были разработаны модели, учитывающие как стесненность, возникающую при движении дисперсной фазы, так и взаимодействие частиц.

Алгоритм расчета периодического расслаивания гетерофазных систем [46]. Исходя из физического представления процесса расслаивания жидких неоднородных смесей была предложена зонная модель расслаивания с различным характером движения капель дисперсной фазы (рис. 7.7). Выделяются следующие зоны: зона чистой сплошной фазы, зона стесненного осаждения капель, зона плотной упаковки капель и зона чистой дисперсной фазы.

Описание движения дисперсной фазы в зоне стесненного осаждения включает уравнение неразрывности и уравнение, определяющее скорость движения капель. С учетом взаимодействия капель друг с другом уравнение неразрывности для капель объемом v запишется в виде

$$\begin{aligned} \partial c(t, x, v) / \partial t + \partial [u(t, x, v) c(t, x, v)] / \partial x = \\ = \frac{\lambda}{2} \int_0^v c(t, x, v-v^*) c(t, x, v^*) dv^* - \lambda \int_0^v c(t, x, v) c(t, x, v^*) dv^*. \end{aligned} \quad (7.70)$$

Здесь $c(t, x, v)$ — частичная функция плотности распределения капель дисперсной фазы по объемам; $u(t, x, v)$ — скорость движения капель объемом v ; t — время; x — вертикальная координата; v — объем капли.

Первый интеграл в правой части (7.70) характеризует прибыль капель объемом v за счет коалесценции более мелких капель, а второй — их убыль вследствие коалесценции капель объемом v

с другими каплями. Константа λ пропорциональна вероятности коалесценции каплей при их столкновении и определяется из условия минимума отклонений экспериментальных и расчетных данных изменения функции распределения частиц по размерам по высоте зоны осаждения.

При малых значениях числа Рейнольдса для частиц дисперсной фазы ($Re_d < 5$) движение жидкости относительно частиц можно рассматривать ползущим. Тогда с учетом вытеснения сплошной фазы для скорости движения частиц объемом v в зоне 2 можно записать уравнение

$$u(t, x, v) + \frac{\int_0^{v_m} c(t, x, v) u(t, x, v) dv}{1 - c_0} = u_{вз}(v, M_1, M_2, M_3, c_0), \quad (7.74)$$

где v_m — максимальный объем частиц в системе; $u_{вз}$ — взвешивающая скорость движения частиц относительно жидкости, зависящая от объема рассматриваемого сорта частиц v , первых трех моментов функции распределения частиц по размерам M_1, M_2, M_3 , общей концентрации частиц c_0 и учитывающая вязкие взаимодействия частиц между собой.

Для зоны 3 характерен постоянный контакт капель друг с другом, при котором происходит постепенное утончение пленки сплошной фазы и ее разрыв с последующей коалесценцией. Наряду с коалесценцией каплей внутри зоны на ее границе с чистой дисперсной фазой происходит коалесценция капель через границу раздела фаз. Скорость движения капель в этой зоне постоянная и определяется величиной потока дисперсной фазы, коалесцирующей через поверхность раздела фаз.

Уравнение неразрывности для зоны 3 имеет вид

$$\frac{\partial f(t, x, v)}{\partial t} + u \frac{\partial f(t, x, v)}{\partial x} = \frac{\lambda'}{2} \int_0^x f(t, x, v - v^*) f(t, x, v^*) dv^* - \lambda' \int_0^x f(t, x, v) f(t, x, v^*) dv^*, \quad (7.72)$$

где $f(t, x, v)$ — функция плотности распределения капель по объемам в зоне плотной упаковки. Так как в этой зоне капли находятся в постоянном контакте друг с другом, скорость их движения u может быть принята одинаковой для всех объемов капель и по всей высоте зоны. Ее величина определяется потоком дисперсной фазы $Q_{гр}$, коалесцирующим через поверхность раздела фаз:

$$u = Q_{гр}/\eta, \quad (7.73)$$

где η — объемная эффективность упаковки капель дисперсной фазы.

Поток дисперсной фазы $Q_{гр}$, коалесцирующей через поверхность раздела, определяется функцией распределения капель по объему у границы раздела фаз $f_{гр}(v)$, поверхностной эффективностью упаковки капель у границы раздела $\eta_{гр}$, временем коалесценции $\tau_{гр}(v)$ и диаметром коалесцирующих капель d :

$$Q_{гр} = \int_0^{v_m} \frac{2\eta_{гр} f_{гр}(v) d}{3\tau_{гр}(v)} dv. \quad (7.74)$$

Подынтегральное выражение в уравнении (7.74) определяет количество дисперсной фазы, переносимой через единичную поверхность раздела фаз в единицу времени за счет коалесценции капель объемом v . Для определения времени коалесценции каплей объемом v через границу раздела фаз можно воспользоваться эмпирическим соотношением, предложенным в [44]:

$$\tau_{гр}(v) = 1,32 \cdot 10^5 \mu \gamma^{-1,32} (9,81 \Delta \rho)^{0,32} (6v/\pi)^{0,1967}. \quad (7.75)$$

Это соотношение имеет обобщенный характер и точность его невелика. С целью повышения точности целесообразно ввести параметр K , значение которого будет находиться по экспериментальным значениям потока дисперсной фазы, коалесцирующего через поверхность раздела, т. е. (7.75) записать в виде

$$\tau_{гр}(v) = K \psi(\mu, \gamma, \Delta \rho, v). \quad (7.76)$$

Изменение высоты зоны чистой дисперсной фазы H_4 и зоны плотной упаковки капель H_3 при расслаивании определим с помощью уравнений

$$dH_4/dt = Q_{гр}(t); \quad (7.77)$$

$$dH_3/dt = (Q_D - Q_{гр})/\eta \quad (7.78)$$

при следующих начальных условиях: $t = 0; H_4 = H_3 = 0$.

Поток дисперсной фазы у верхней границы зоны плотной упаковки в уравнении (7.78) определяется как

$$Q_D = \int_0^{v_m} v c(t, x, v) u(t, x, v) dv. \quad (7.79)$$

Система уравнений (7.70)–(7.78) может быть решена конечно-разностным методом с использованием схемы расщепления по времени. Соответствующая разностная форма уравнения (7.70) имеет вид

$$\frac{\bar{c}_{ij} - \bar{c}_{ij}^*}{\tau} + u_{ij} \frac{\bar{c}_{ij} - \bar{c}_{i-1,j}}{h} + \bar{c}_{ij} \frac{u_{ij} - u_{i-1,j}}{h} = 0; \quad (7.80)$$

$$\frac{\bar{c}_{ij} - \bar{c}_{ij}^*}{\tau} + \frac{\lambda}{2} \sum_{k=1}^j \bar{c}_{i,j-k} \bar{c}_{ik} + \lambda \sum_{k=1}^j \bar{c}_{ij} \bar{c}_{ik} = 0, \quad (7.81)$$

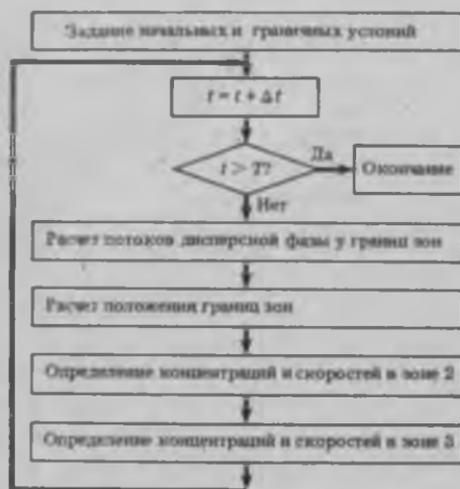


Рис. 7.8. Алгоритм расчета периодического декантатора

где c_{ij}^* — концентрация частиц в момент времени t ; c_{ij} — концентрация частиц в момент времени $t + \tau$; \bar{c}_{ij} — промежуточная концентрация частиц; τ, h — соответствующие приращения по времени и координате.

Аналогичная разностная схема записывается и для уравнения (7.72). Начальное и граничное условия для уравнений (7.80), (7.81) имеют вид

$$\begin{aligned} c_{ij} &= c \quad \text{при } t = 0; \quad 0 < x \leq H; \\ c_{ij} &= 0 \quad \text{при } x = 0; \quad 0 < t \leq T. \end{aligned} \quad (7.82)$$

Алгоритм решения системы уравнений (7.80) и (7.81) приведен на рис. 7.8.

Предложенная модель была использована для расчета расслаивания системы этилацетат—вода. Число узлов разбиения по переменной t составляло 10. Сходящееся решение было получено при соотношении величин шагов по времени и координате, равном $\Delta t : \Delta h \approx 7/6$. Погрешность расчета оценивалась по количеству дисперсной фазы, прошедшей через границу в течение полного времени расслаивания, а ее максимально допустимое значение не превышало 10%.

В качестве исходной информации для расчета использовались физико-химические свойства компонентов (вязкость, плотность, поверхностное натяжение) и начальное распределение дисперсной фазы (водной) по высоте столба эмульсии. Из предварительных экспериментальных данных распределения капель дисперсной фазы по размерам но высоте столба эмульсии были определены значения параметров модели минимизацией отклонения экспериментальных и расчетных данных. К таким параметрам относятся $\lambda = 0$; $\lambda' = 10^{-2}$; $K = 0,0011$.

Экспериментальное определение высоты зон и функции распределения капель по размерам проводилось с помощью фотографирования.

Расчетные профили концентрации по высоте в зоне стесненного движения капель (зона 2) в различные моменты времени приведены на рис. 7.9. Результаты расчета профилей концентраций показывают монотонное убывание концентрации дисперсной фазы

Рис. 7.9. Изменение относительной концентрации капель размером 0,8 мкм по высоте зоны 2 в различные моменты времени (σ — концентрация капель в начальный момент; общая концентрация дисперсной фазы 32%)

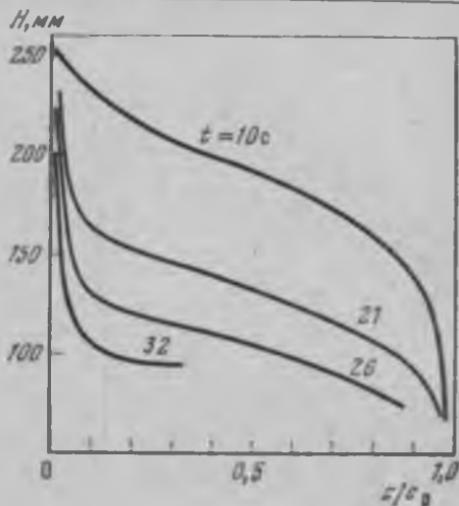


Рис. 7.10. Изменение высоты слоя дисперсной фазы при общей ее концентрации 32%

1 — общая высота 260 мм; 2 — общая высота 376 мм; 3 — расчетные значения; 4 — экспериментальные значения

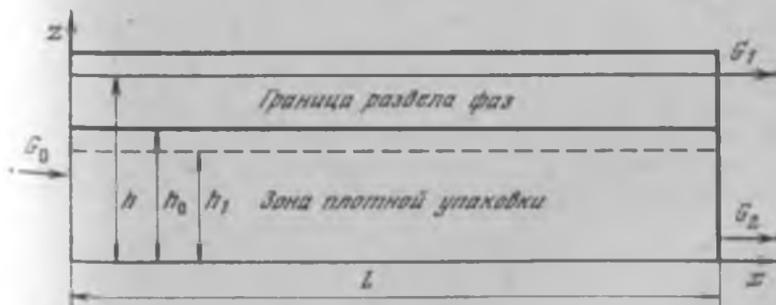
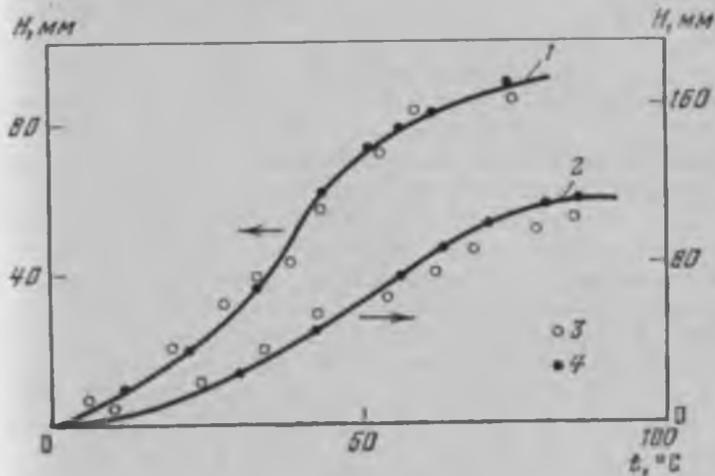


Рис. 7.11. Схема горизонтального декантатора для расслаивания жидких суспензий

Таблица 7.2

Высота H , мм	Время расслаивания при концентрации дисперсной фазы, с			
	20%		30%	
	расчет	эксперимент	расчет	эксперимент
150	32	40	31	40
200	63	61	53	47
260	68	68	74	62
300	79	75	79	72
355	88	101	105	98

как по высоте зоны, так и во времени. В то же время концентрация капель оказывает значительное влияние на скорость их движения. Изменение ее от 0 до 32% приводит к уменьшению скорости движения капель в среднем в 12 раз.

Сравнение экспериментальных и расчетных данных по расслаиванию системы вода—этилацетат приведено на рис. 7.10 и в табл. 7.2.

Значения полного времени расслаивания в таблице приведены при двух различных начальных концентрациях дисперсной фазы. Как следует из результатов расчета, совпадение экспериментальных и расчетных данных вполне удовлетворительное.

Алгоритм расчета непрерывного расслаивания в аппаратах с горизонтальным течением [47]. Разделение неоднородных жидких смесей в аппаратах горизонтального типа (рис. 7.11) является распространенным способом декантации. Исходная смесь в количестве G_0 поступает на вход аппарата, где по мере горизонтального течения разделяется на два слоя: верхний, легкий слой, отбираемый в количестве G_1 , и нижний, тяжелый, отбираемый в количестве G_2 . Процесс расслаивания жидкостей в элементарном объеме протекает таким образом, что, как и ранее [46], для его описания можно воспользоваться зонным представлением.

Описание движения дисперсной фазы в зоне стесненного осаждения (всплывания) включает уравнение неразрывности и уравнения, определяющие скорость движения капель. С учетом взаимодействия капель уравнение неразрывности для капель объемом v можно записать в виде

$$u_x \frac{\partial c(x, z, v)}{\partial x} + \frac{\partial [c(x, z, v) u_x]}{\partial z} = \frac{\lambda}{2} \int_0^v c(x, z, v - v^*) \tau(x, z, v^*) \times \\ \times dv^* - \lambda \int_0^v c(x, z, v) c(x, z, v^*) dv^* \quad (7.83)$$

с граничными условиями

$$x = 0, h_2 < z < h_1, c(0, z, v) = c_1(v); \quad (7.84)$$

$$z = h_2, 0 \leq x \leq l, c(x, 0, v) = c_2(v), \quad (7.85)$$

где $c(x, z, v)$ — частичная функция плотности распределения капель дисперсной фазы по объемам; v — объем; v_m — максимальный объем капель в системе; u_x, u_z — соответственно горизонтальная и вертикальная составляющие скорости; x, y, z — координаты; h_1 — расстояние до границы зоны плотной упаковки капель; h_2 — высота чистой сплошной фазы при $x = 0$; l — длина декантатора.

Первый и второй интегралы в правой части уравнения (7.83) характеризуют соответственно прибыль капель объемом v за счет коалесценции более мелких капель и их убыль вследствие коалесценции капель объемом v с другими каплями. Для определения горизонтальной составляющей скорости движения дисперсной фазы u_x будем рассматривать горизонтальное течение двухфазной смеси как квазигомогенное. Такое допущение справедливо, когда частицы имеют малый размер и отношение вязкостей невелико. Тогда для ламинарного горизонтального потока квазигомогенной смеси по декантатору можно использовать решение уравнения Навье—Стокса для ламинарного течения жидкости в открытом канале прямоугольного сечения при свойствах жидкости, вычисленных через свойства фаз. В этом случае профиль горизонтальной составляющей скорости $u_x(z)$ по высоте канала будет определяться:

$$u_x(z) = \frac{2}{b} \int_0^{b/2} u_x(z, y) dy, \quad (7.86)$$

где

$$u_x(z, y) = \frac{gs}{2\nu} h^2 \left[1 - \frac{(h-z)^2}{h^2} - \frac{32}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)^2} \times \right. \\ \left. \times \left(\operatorname{ch} \frac{2n+1}{2} \frac{\pi y}{h} \right) / \left(\operatorname{ch} \frac{2n+1}{2} \frac{\pi b}{2h} \right) \cos \frac{2n+1}{2} \frac{\pi(h-z)}{h} \right];$$

b — ширина декантатора; h — высота слоя жидкости в декантаторе; ν — кинематическая вязкость; s — наклон канала.

Вертикальную составляющую скорости дисперсной фазы u_z будем искать как разность скорости движения частиц относительно жидкости (взвешивающая скорость) и противоположно направленной вертикальной составляющей скорости сплошной фазы u_{zc} . Взвешивающая скорость определяется с учетом стесненности движения частиц через моменты функции распределения частиц по размерам M_1, M_2, M_3 , объем частицы v и общую концентрацию частиц φ [30]. Для определения вертикальной составляющей скорости сплошной фазы u_{zc} воспользуемся уравнением неразрыв-

ности для сплошной фазы, которое с учетом постоянства горизонтальной составляющей u_{xc} запишется в виде

$$u_{xc} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x} + \frac{\partial (\varepsilon u_{zc})}{\partial z} = 0, \quad (7.87)$$

где ε — объемная доля сплошной фазы; $z = h_z$; $u_{zc} = u_{z0}$.

Уравнение неразрывности потока дисперсной фазы в зоне плотной упаковки капель имеет вид

$$u_x \frac{\partial f(x, z, v)}{\partial x} + u_z \frac{\partial f(x, z, v)}{\partial z} = \frac{N'}{2} \int_0^z f(x, z, v - v^*) f(x, z, v^*) \times dv^* - k' \int_0^{r_M} f(x, z, v) f(x, z, v^*) dv^* \quad (7.88)$$

при следующих граничных условиях:

$$\begin{aligned} x = 0, \quad h_1 < z < h_0, \quad f(0, z, v) &= f_0(v); \\ z = h_1, \quad 0 \leq x \leq l, \quad f(x, 0, v) &= f_{гр}(v). \end{aligned} \quad (7.89)$$

Здесь $f(x, z, v)$ — функция плотности распределения капель по объемам в зоне плотной упаковки; h_0 — расстояние до границы раздела фаз.

Так как в зоне плотной упаковки капли находятся в постоянном контакте друг с другом, вертикальная составляющая скорости их движения u_z может быть принята одинаковой для всех объемов капель по всей высоте зоны u . Она определяется величиной потока дисперсной фазы $Q_{гр}$, коалесцирующего через поверхность раздела, и объемной эффективностью упаковки капель дисперсной фазы η :

$$u_z = Q_{гр}/\eta \quad (7.90)$$

Поток дисперсной фазы $Q_{гр}$, коалесцирующий через поверхность раздела, определяется функцией распределения капель по объему $f_{гр}(x, v)$, поверхностной эффективностью упаковки капель у границы раздела $\eta_{гр}$, временем коалесценции $\tau_{гр}(v)$ и диаметром коалесцирующих капель d :

$$Q_{гр}(x) = \int_0^{r_M} \frac{2\eta_{гр} f_{гр}(x, v) d}{3\tau_{гр}(v)} dv. \quad (7.91)$$

Время коалесценции капля—поверхность раздела фаз $\tau_{гр}(v)$ зависит от объема капли v , физических свойств и высоте зоны плотной упаковки капель $h_0 - h_1$. Для его определения воспользуемся соотношением

$$\tau_{гр}(v) = \tau_0(v) - k \frac{\eta(h_0 - h_1)}{Q_{гр}}. \quad (7.92)$$

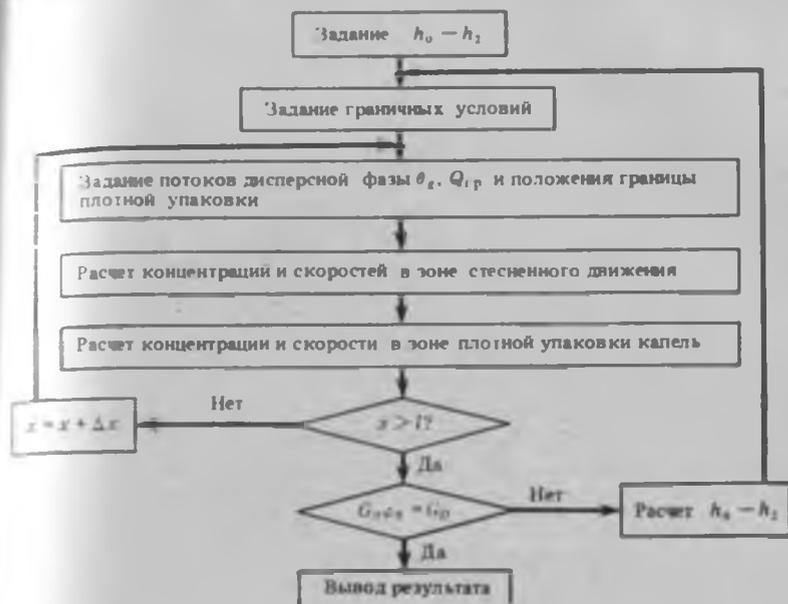


Рис. 7.12. Алгоритм расчета непрерывного расслаивания

Время коалесценции одиночной капли у поверхности раздела может быть рассчитано по одному из эмпирических соотношений, определяющих зависимость времени коалесценции капли от физических свойств фаз и диаметра капли (формула (7.75)).

Для стационарных условий введения процесса расслаивания высота зоны плотной упаковки капель $h_0 - h_1$ должна удовлетворять следующему условию:

$$Q_D(x) = Q_{ГР}(x, h_0 - h_1). \quad (7.93)$$

Величина потока дисперсной фазы $Q_D(x)$ в уравнении (7.93) зависит от концентрации и скорости движения частиц у границы зоны плотной упаковки капель и определяется выражением

$$Q_D(x) = \int_{\Pi} v c(x, h, v) u_x(x, h, v) dv. \quad (7.94)$$

Высота дисперсии $h_0 - h_2$ при $x = 0$ определяет общее количество дисперсной фазы, проходящее в единицу времени через декантатор в вертикальном направлении G_D , и определяется из условия

$$G_0 \varphi_0 = G_D, \quad (7.95)$$

где φ_0 — объемная доля дисперсной фазы в питании, а количество

дисперсной фазы равно

$$G_D = b \int_0^l Q_D(x) dx. \quad (7.90)$$

Для решения системы уравнений (7.83)–(7.96) был применен метод конечных разностей, алгоритм которого приведен на рис. 7.12.

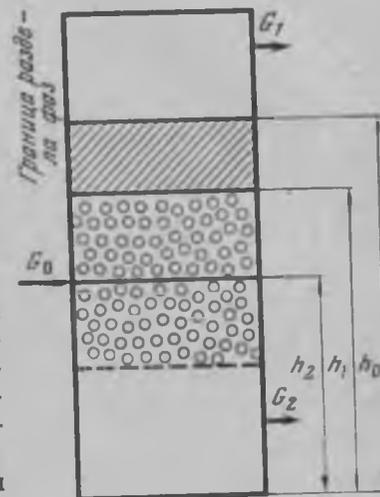
Для оценки модели проводилось экспериментальное исследование непрерывного расслаивания в горизонтальном декантаторе смеси винилацетат–вода. Декантатор имел стеклянные прозрачные стенки, что позволило фиксировать картину расслаивания. Основные размеры декантатора: длина — 68, высота — 24,5 и ширина — 25 см. Эксперименты проводились при различных расходах и концентрации дисперсной фазы (органической), от режима недогрузки и режима захлебывания. Одновременно проводился расчет при заданных условиях. Параметры K , λ и λ' оценивались по данным по периодическому расслаиванию данной смеси и составляли $K = 0,0025$, $\lambda = 0,2$, $\lambda' = 0,005$. Параметр K определялся по экспериментальным значениям потока дисперсной фазы через границу раздела фаз, толщины зоны плотной упаковки капель и функции распределения капель по размерам у границы раздела, а λ и λ' — по функции распределения капель по размерам соответственно в зоне стесненного осаждения и верхней упаковке. Определение функции распределения капель по размерам производилось с помощью фотографирования. В табл. 7.3 приведены экспериментальные и расчетные значения объема образующегося дисперсного слоя для различных нагрузок исходной смеси и концентрации дисперсной фазы. Результаты свидетельствуют об удовлетворительном соответствии расчета и эксперимента.

Таблица 7.3

Питание, л/ч	Объемная доля дисперсной фазы, %	Объем зоны стесненного всплывания капель, дм³	
		расчет	эксперимент
60,4	10,6	0,3	0,2
79,7	7,1	4,5	5,1
176,5	15,0	5,3	5,95
262,2	10,0	10,8	11,27
307,7	2,5	14,0	16,15
400,0	15,0	Захлебывание	Захлебывание

Алгоритмы расчета непрерывного расслаивания в аппарате вертикального типа. По сравнению с аппаратом горизонтального типа в данном случае отсутствует горизонтальная составляющая

Рис. 7.13. Схема аппарата вертикального типа



скорости движения и распределение дисперсной фазы внутри любого горизонтального сечения аппарата постоянно. Исходная смесь (рис. 7.13) обычно подается в среднюю часть аппарата, а отстоявшиеся фазы отбираются из нижней и верхней частей. Описание процесса расслаивания в вертикальном аппарате, как и ранее, удобно рассматривать с позиций зонного представления механизма.

В зоне стесненного движения дисперсной фазы справедливы следующие уравнения неразрывности потока капель объемом v с учетом взаимодействия в дисперсной фазе:

$$\frac{\partial [c(z, v)] u_z}{\partial z} = \frac{\lambda}{2} \int_0^{v_m} c(z, v - v^*) c(z, v^*) dv^* - \lambda' \int_0^{v_m} c(z, v) c(z, v^*) dv^* \quad (7.97)$$

с граничными условиями

$$z = h_2, c(h_2, v) = c_0(v). \quad (7.98)$$

Скорость движения капель дисперсной фазы u_z определяется как разность между скоростью движения капель относительно сплошной фазы $u_{вз}$ (взвешивающая скорость) и скоростью движения сплошной фазы u_{zc}

$$u_z = u_{вз} - u_{zc}, \quad (7.99)$$

где взвешивающая скорость $u_{вз}$ определяется по уравнениям, приведенным в [30], а скорость сплошной фазы с учетом присутствия капель дисперсной фазы определяется через объемный поток сплошной фазы $Q_{сф}$ и объемную долю дисперсной фазы φ :

$$u_{zc} = Q_{сф} / (1 - \varphi). \quad (7.100)$$

Уравнение неразрывности потока капель дисперсной фазы объемом v в зоне плотной упаковки капель с учетом постоянства скорости движения капель записывается

$$u_z \frac{\partial f(z, v)}{\partial z} = \frac{\lambda'}{2} \int_0^{v_m} f(z, v - v^*) f(z, v^*) dv^* - \lambda' \int_0^{v_m} f(z, v) f(z, v^*) dv^* \quad (7.101)$$

с граничным условием

$$z = h_1, f(h_1 v) = f_0(v). \quad (7.102)$$

Скорость движения капель в зоне плотной упаковки капель равна

$$u_z = Q_{гп} / \eta, \quad (7.103)$$

где η — объемная эффективность упаковки капель дисперсной фазы, а поток дисперсной фазы, коалесцирующий через границу раздела фаз, определяется по уравнению (7.74).

В стационарных условиях поток дисперсной фазы в декантаторе должен быть постоянным по высоте аппарата. В частности это означает, что

$$Q_D = Q_{гп} [(h_0 - h_1)], \quad (7.104)$$

где поток дисперсной фазы Q_D у границы зоны плотной упаковки определяется по уравнению (7.79). Уравнение (7.104) позволяет определить высоту зоны плотной упаковки капель ($h_0 - h_1$).

Условие стационарности процесса означает также равенство потоков Q_D и потока дисперсной фазы в питании

$$G_0 \varphi_0 / s = Q_D. \quad (7.105)$$

где G_0 — количество питания; φ_0 — объемная доля дисперсной фазы в питании, s — сечение декантатора.

Если поток дисперсной фазы Q_D в сечении подачи питания больше или равен $G_0 \varphi_0 / s$, образуется зона стесненного движения капель между точкой ввода питания и зоной плотной упаковки. Однако если $Q_D < G_0 \varphi_0 / s$, то будет происходить накопление капель дисперсной фазы, что приведет к образованию дополнительной зоны, расположенной до места ввода исходного питания. Роль этой зоны при непрерывном расслаивании сводится к коалесценции капель дисперсной фазы внутри нее и, следовательно, увеличению потока дисперсной фазы Q_D в сечении питания. Поэтому данную зону можно назвать зоной роста капель.

Рост капель внутри зоны роста может быть описан следующим нестационарным уравнением

$$\begin{aligned} \frac{dc(t, v)}{dt} = n_{вх}(u) + \frac{\lambda}{2} \int_0^v c(v - v^*) c(v^*) dv^* - \\ - \lambda \int_0^{v_{вх}} c(v) c(v^*) dv^* - Pc(v), \end{aligned} \quad (7.106)$$

где $n_{вх}(v) dv$ — число капель объемом от v до $v + dv$, поступающих в единицу объема зоны роста; P — частота выхода капель из зоны.

Количество дисперсной фазы, поступающее в зону роста через единицу поверхности декантатора ΔQ , равно разности между потоком дисперсной фазы, проходящим через декантатор с начальным распределением Q_{D_0} , и потоком дисперсной фазы, поступающим на единицу площади поперечного сечения, декантатора $G_0\varphi_0/s$:

$$\Delta Q = G_0\varphi_0/s - Q_{D_0}. \quad (7.107)$$

Число капель объемом от v до $v + dv$, поступающих в единицу объема зоны роста, $n_0(v) dv$ равно

$$n_{\text{нх}}(v) dv = n_0(v) dv = \frac{\Delta Q_0/V_{\text{зр}}}{\int_0^{v_m} va(v) dv} a(v) dv, \quad (7.108)$$

где $a(v)$ — распределение капель по объемам в питании.

Частота выхода капель из зоны роста P определяется в виде

$$P = \frac{\Delta Q_0/V_{\text{зр}}}{\int_0^{v_m} va(v) n_0 dv} = \frac{\Delta Q/H_{\text{зр}}}{|\varphi_0|}, \quad (7.109)$$

где n_0 — общее число капель в единице объема питания; $H_{\text{зр}}$ — высота зоны роста; φ_0 — объемная доля дисперсной фазы в питании.

Решение интегрального уравнения (7.106) для стационарных условий при заданном объеме (высоте) зоны роста капель позволяет определить частичную функцию распределения капель по объемам, покидающих зону роста $c_p(v)$. Тогда результирующая частичная функция распределения капель по объемам в сечении питания $c_f(v)$ будет

$$c_f(v) = kc_0(v) + (1 - k)c_p(v), \quad (7.110)$$

где $(1 - k)$ — доля питания, поступающая в зону роста;

$$k = Q_{D_0}/(G_0\varphi_0/s). \quad (7.111)$$

Объем зоны роста капель $V_{\text{зр}}$ (а при заданном сечении — ее высота) определяется из условия (7.105).

Таким образом, если подаваемый поток дисперсной фазы $G_0\varphi_0/s > Q_D$ (с концентрацией $c_0(v)$), то будет образовываться зона роста капель, размеры которой могут быть рассчитаны по уравнениям (7.106) — (7.111).

Собственно зона стесненного движения капель дисперсной фазы не играет особой роли в процессе расслаивания, и поэтому объем ее целесообразно уменьшить до минимума. Минимальный объем зоны можно оценить из условия, что время пребывания

капель дисперсной фазы в ней не превышает время коалесценции наиболее медленно коалесцирующих капель, т. е. при известном сечении декантатора будем иметь

$$\varphi_0 h_{\min} / Q_D = t_k, \quad (7.113)$$

где t_k — время коалесценции через поверхность раздела фаз наиболее медленно коалесцирующих капель.

Оценка параметров моделей. Для применения моделей к расчету реальных процессов расслаивания необходимо по экспериментальным данным вычислить константы, характеризующие коалесценцию капель у поверхности раздела фаз K , коалесценцию капель в зоне плотной упаковки λ' и коалесценцию капель в зоне стесненного движения λ . Определение этих констант производится по экспериментальным данным по периодическому расслаиванию смеси.

Константа K входит в выражение для времени коалесценции капли у поверхности раздела фаз:

$$\tau = \tau_0 - K\eta \frac{\Delta H}{v_0}. \quad (7.113)$$

Здесь τ — время коалесценции капли; τ_0 — время коалесценции без учета влияния толщины зоны плотной упаковки капель ΔH ; v_0 — поток дисперсной фазы.

При проведении экспериментов фотографическим способом измерялись толщина зоны плотной упаковки капель ΔH ; функция распределения капель по размерам у границы раздела $f_{gr}(v)$; коалесцирующий поток дисперсной фазы через границу раздела фаз $Q_{gr}(t)$. Значение параметра K определяется путем минимизации рассогласования между значениями теоретически рассчитанного и определенного экспериментального потока Q_{gr} .

Для расчета константы λ' эксперименты проводятся при высоких концентрациях дисперсной фазы, в результате чего находятся распределения капель по размерам у границы фронта осаждения (всплывания) в разные моменты времени. По функции распределения капель оценивается средний диаметр капель в различные моменты времени как

$$d_{ср}(t) = \sum d_i n_i(t) / n_0, \quad (7.114)$$

где n_0 — общее число капель. С другой стороны, путем решения уравнения, определяющего динамику изменения распределения капель по размерам в зоне плотной упаковки, можно получить выражение для роста среднего диаметра капель в системе:

$$d^2 = d_0^2 (\lambda' t / 2). \quad (7.115)$$

Поиск искомой константы λ' производится путем минимизации рассогласования между экспериментальными и расчетными значениями среднего диаметра.

Оценка константы λ аналогична предыдущему, за тем исключением, что опыты проводятся в таких условиях, чтобы весь поток дисперсной фазы, подходящий к границе раздела фаз, коалесцировал. В этих условиях изменение функции распределения будет характеризовать рост капель за счет их коалесценции.

Расчет фазового равновесия жидкость—жидкость—пар. Определение равновесных составов жидких и паровых фаз представляет собой более сложную задачу по сравнению с расчетом парожидкостного равновесия. Более того, равновесие жидкость—пар и жидкость—жидкость можно рассматривать как частные случаи равновесия жидкость—жидкость—пар; первое — когда расслаивание в жидкости отсутствует и второе — когда в равновесии не участвует паровая фаза.

В общем случае расчет равновесия жидкость—жидкость—пар состоит в определении составов сосуществующих жидких фаз и паровой фазы, а также температуры кипения по брутто-составу жидкой фазы. Таким образом, неизвестными являются $3k + 1$ переменная, где k — число компонентов. Соответственно опишем систему являются $2k$ уравнений, вытекающих из равенств (4.21), которые удобно записать в виде

$$x_i^{(1)} \gamma_i^{(1)}(x_i^{(1)}, T) = x_i^{(2)} \gamma_i^{(2)}(x_i^{(2)}, T), \quad i = 1, 2, \dots, k; \quad (7.116)$$

$$x_i^{(2)} \gamma_i^{(2)}(x_i^{(2)}, T) P_i^0(T) = \varphi_i y_i P$$

или

$$x_i^{(1)} \gamma_i^{(1)}(x_i^{(1)}, T) P_i^{(0)}(T) = \varphi_i y_i P, \quad i = 1, 2, \dots, k; \quad (7.117)$$

стехиометрические соотношения в виде

$$\sum_i y_i = \sum_i x_i^{(1)} = \sum_i x_i^{(2)} = \sum_i x_i = 1 \quad (7.118)$$

и уравнения материального баланса по жидким фазам

$$x_i = \eta x_i^{(1)} + (1 - \eta) x_i^{(2)}, \quad i = 1, 2, \dots, k, \quad (7.119)$$

где η — фактор расслаивания, принимающий значения $0 \leq \eta \leq 1$. При $\eta \neq 0$ или 1 присутствуют две жидкие фазы.

Для учета неидеальности жидкой фазы можно воспользоваться уравнением НРТЛ (4.24), хотя принципиально при наличии достоверных экспериментальных данных могут быть применены и другие уравнения.

Система уравнений (7.116) — (7.119) является замкнутой и может быть решена одним из методов решения нелинейных уравнений. Так, в [48] для решения уравнений материального баланса (7.119) использован метод последовательных приближений, а в [49] — метод Ньютона—Рафсона. Расчет при известном брутто-составе жидкости и давлении состоит в следующем: задается на-

начальное значение температуры; по известному брутто-составу определяются составы равновесных жидких фаз; рассчитывается состав паровой фазы по уравнению (7.117); корректируется температура по уравнению (7.118) и если не достигнуто решение, расчеты повторяются.

Таким образом, в отличие от парожидкостного равновесия в этом случае необходимо на каждой итерации по расчету состава пара и температуры по алгоритмам, рассмотренным ранее, определять составы жидких фаз.

Расчет составов жидких фаз по брутто-составу заключен в следующем.

Представим уравнение (7.119) в виде

$$x_i^{(1)} = \frac{x_i}{\eta(K_i - 1) + 1}, \quad i = 1, 2, \dots, k, \quad (7.119)$$

где K_i — константа равновесия i -го компонента в системе жидкость—жидкость, величина которой, как следует из уравнения (7.116), определяется по выражению

$$K_i = \frac{x_i^{(2)}}{x_i^{(1)}} = \frac{y_i^{(1)}}{y_i^{(2)}}. \quad (7.120)$$

Система уравнений (7.116), (7.120) содержит $2k$ уравнений $2k + 1$ неизвестными ($x_i^{(1)}$, $x_i^{(2)}$, $i = 1, 2, \dots, k$ и η). Поэтому для решения необходимо записать еще одно уравнение, в качестве которого можно взять стехиометрическое соотношение

$$\sum_{i=1}^k x_i^{(1)} - \sum_{i=1}^k x_i^{(2)} = 0 \quad \text{или} \quad \sum_{i=1}^k \frac{x_i}{\eta(K_i - 1) + 1} - \sum_{i=1}^k K_i x_i^{(1)} = 0 \quad (7.121)$$

Система уравнений (7.116), (7.120) и (7.122) является нелинейной, и для ее решения необходимо использовать либо методы нелинейного программирования, либо итерационные методы. Наиболее целесообразным с точки зрения затрат машинного времени и вычислительных трудностей являются алгоритмы последовательного определения составов в результате решения уравнений материального баланса (7.120) при заданных значениях констант фазового равновесия, с последующей коррекцией концентраций путем решения уравнений фазового равновесия (7.116). Определение значения фактора расслаивания производится решением уравнения (7.122).

Для расчета составов жидких фаз по уравнениям баланса (7.120) необходимо задать начальные значения констант фазового равновесия K_i и вычислять величину фактора расслаивания. Значения констант задаются исходя из условия существования двух

после каждой фаз, т.е.

$$\left[1 - \sum_{i=1}^k K_i x_i\right] \left[\sum_{i=1}^k \frac{x_i}{K_i} - 1\right] < 0, \quad (7.123)$$

а фактор расслаивания определяется решением уравнения (7.122) по методу касательных по формуле

$$\eta_{i+1} = \eta_i + \sum_{i=1}^k (x_i^{(1)} - x_i^{(2)}) / \sum_{i=1}^k \frac{(x_i^{(1)} - x_i^{(2)})}{x_i}. \quad (7.124)$$

Вычисленные таким образом составы фаз не удовлетворяют системе уравнений равновесия (7.116), поскольку константы K_i , вообще говоря, заданы произвольно. Поэтому следующим этапом является их коррекция путем решения системы уравнений (7.116). По существу, найденные составы являются начальным приближением для решения системы нелинейных алгебраических уравнений (7.116). Полученные значения составов в результате решения системы (7.116) в дальнейшем используются для уточнения констант фазового равновесия по соотношению (7.121), после чего вновь решается система уравнения материального баланса (7.120). Итерационный процесс решения продолжается до тех пор, пока не будут одновременно выполняться с заданной точностью уравнения баланса и равновесия.

Рассмотрим алгоритм решения системы уравнения (7.116) по методу Ньютона — Рафсона. Представим систему уравнений (7.116) в виде

$$\Phi_i^{(1)} = \Phi_i^{(2)}, \quad i = 1, 2, \dots, k, \quad (7.125)$$

где $\Phi_i^{(j)}$ — активность i -го компонента в j -й фазе, зависящая при заданной температуре от состава:

$$\Phi_i^{(j)} = x_i^{(j)} \gamma_i^{(j)}. \quad (7.126)$$

Разложим функцию $\Phi_i^{(j)}$ в ряд Тейлора до членов первого порядка в окрестностях состава фаз $x_i^{(1)*}$ и $x_i^{(2)*}$, вычисленных в результате решения уравнений материального баланса

$$\Phi_i^{(j)} = \Phi_i^{(j)*} + \sum_{i=1}^k \left(\frac{\partial \Phi_i^{(j)}}{\partial x_i^{(j)}} \right) \Delta x_i^{(j)}. \quad (7.127)$$

Тогда (7.125) можно записать в виде

$$\sum_{i=1}^k \left[\left(\frac{\partial \Phi_i^{(1)}}{\partial x_i^{(1)}} \right) \Delta x_i^{(1)} - \left(\frac{\partial \Phi_i^{(2)}}{\partial x_i^{(2)}} \right) \Delta x_i^{(2)} \right] = \Phi_i^{(2)*} - \Phi_i^{(1)*}, \quad (7.128)$$

$$i = 1, 2, \dots, k.$$

Если воспользоваться свойством $\sum_{i=1}^k \Delta x_i = 0$, то систему уравнений (7.128) можно записать относительно приращений концентраций $(k-1)$ -го компонента

$$\sum_{j=1}^{i-1} \left(\frac{\partial \Phi_i^{(1)}}{\partial x_j^{(1)}} - \frac{\partial \Phi_i^{(1)}}{\partial x_k^{(1)}} \right) \Delta x_j^{(1)} - \left(\frac{\partial \Phi_i^{(2)}}{\partial x_j^{(2)}} - \frac{\partial \Phi_i^{(2)}}{\partial x_k^{(2)}} \right) \Delta x_j^{(2)} = \Phi_i^{(2)0} - \Phi_i^{(1)0}, \quad i = 1, 2, \dots, k-1. \quad (7.129)$$

Введем дополнительные переменные

$$\lambda_i = \frac{x_i^{(1)} - x_i^{(1)*}}{x_i^{(1)} - x_i^{(1)*}} = \frac{x_i^{(2)*} - x_i^{(1)*}}{x_i^{(1)*} - x_i^{(1)*}}, \quad (7.130)$$

Тогда приращение концентрации i -го компонента в первой фазе можно выразить как

$$\Delta x_i^{(1)} = \lambda_i \Delta x_i^{(1)}, \quad (7.131)$$

а систему уравнений (7.129) записать относительно k неизвестных приращений

$$\sum_{j=1}^{i-1} \left(\frac{\partial \Phi_i^{(1)}}{\partial x_j^{(1)}} - \frac{\partial \Phi_i^{(1)}}{\partial x_k^{(1)}} \right) \lambda_j \Delta x_j^{(1)} - \sum_{j=1}^{k-1} \left(\frac{\partial \Phi_i^{(2)}}{\partial x_j^{(2)}} - \frac{\partial \Phi_i^{(2)}}{\partial x_k^{(2)}} \right) \Delta x_j^{(2)} = \Phi_i^{(2)0} - \Phi_i^{(1)0}, \quad (7.132)$$

где неизвестными являются переменные $(\Delta x_1^{(1)}, \Delta x_1^{(2)}, \Delta x_2^{(2)}, \dots, \Delta x_{k-1}^{(2)})$.

Производные в уравнениях (7.132) вычисляются при составах фаз, определенных путем решения уравнений материального баланса (7.120), по уравнениям

$$\frac{\partial \Phi_i^{(j)}}{\partial x_l^{(j)}} = \begin{cases} x_l^{(j)} \frac{\partial \gamma_l^{(j)}}{\partial x_l^{(j)}}, & l \neq i; \\ \gamma_l^{(j)} + x_l^{(j)} \frac{\partial \gamma_l^{(j)}}{\partial x_l^{(j)}}, & l = i, \end{cases} \quad (7.133)$$

где

$$\frac{\partial \gamma_l^{(j)}}{\partial x_l^{(j)}} = \frac{G_{ll}}{V_l} (\tau_{ll} - z_l) + \frac{G_{ll}}{V_l} (\tau_{ll} - z_l) + \sum_{j=1}^k \frac{x_j G_{lj} G_{ll}}{V_j} \times (2z_j - \tau_{lj} - \tau_{lj});$$

$$z_l = W_l/V_l; \quad V_l = \sum_{i=1}^k x_i G_{li}; \quad W_l = \sum_{i=1}^k x_i G_{li} \tau_{li}.$$

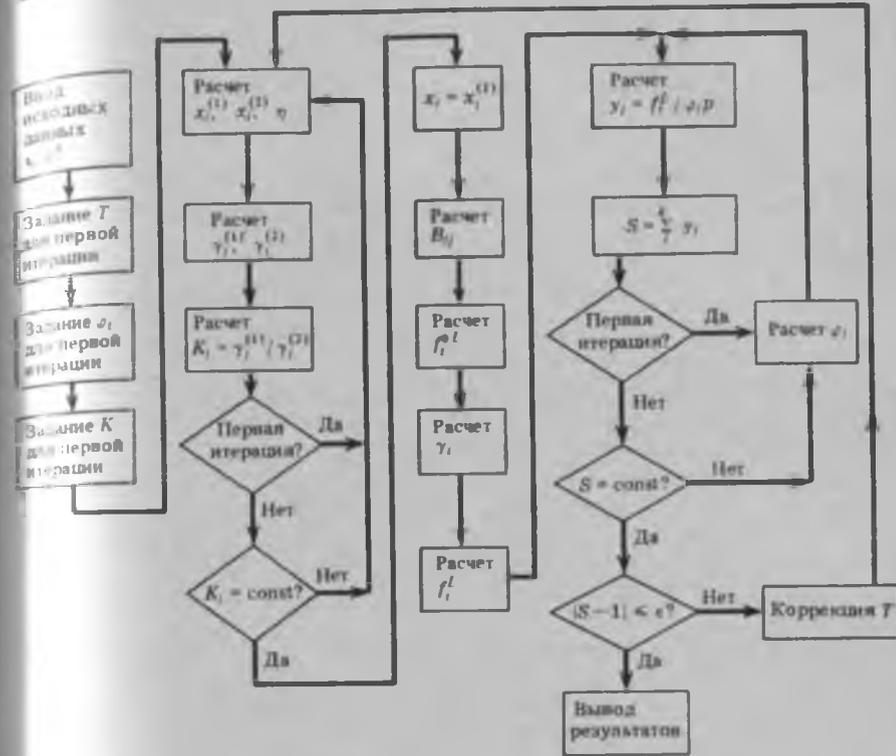


Рис. 7.14. Алгоритм расчета равновесия систем жидкость—жидкость—пар

Система уравнений (7.132) является линейной относительно вектора приращений $(\Delta x_1^{(1)}, \Delta x_1^{(2)}, \Delta x_2^{(2)}, \dots, \Delta x_{k-1}^{(2)})$, и ее решение не представляет трудностей. Приращение концентраций остальных компонентов, а именно $\Delta x_2^{(1)}, \dots, \Delta x_{k-1}^{(1)}$, можно найти по выражениям (7.131). Таким образом, состав фаз, удовлетворяющих системе уравнений фазового равновесия, определяется в соответствии с формулами

$$\begin{aligned} x_i^{(2)} &= x_i^{(2)*} + s \Delta x_i^{(2)}; \\ x_i^{(1)} &= x_i^{(1)*} + s \Delta x_i^{(1)} \lambda_i, \end{aligned} \quad (7.134)$$

где s — корректирующий параметр.

Расчет состава паровой фазы и равновесной температуры по составу одной из жидких фаз проводится решением уравнения (4.22) одним из методов решения уравнений с одной неизвестной. В результате этого расчета будет скорректирована начальная тем-

пература, и если она не отличается от значения на предыдущей итерации, то вычисления прекращаются, в противном случае цикл вычислений повторяется при скорректированном значении температуры. Алгоритм расчета равновесия системы жидкость—жидкость—пар приведен на рис. 7.14.

7.3.2. Алгоритмы расчета массообменных аппаратов

В настоящее время известно большое количество алгоритмов расчета массообменных процессов (ректификация, экстракция, сорбция, адсорбция и т.д.), отличающихся степенью детализации отдельных элементов, но, по сути, предназначенных для решения систем уравнений материального и теплового баланса, нелинейность которых зависит от точности описания парожидкостного равновесия, кинетики массопередачи, гидродинамики потоков. Объем входной информации зависит от точности модели, однако выходная информация подавляющего большинства алгоритмов практически одинаковая — профили концентраций, потоков и температур по высоте аппарата и составы целевых продуктов. Правда, соответствие результатов расчета реальным данным будет определяться тем, насколько точно в модели воспроизведены реальные условия.

Ограничения, принимаемые при расчете массообменных аппаратов. При расчете колонн ограничения или допущения обычно принимаются для упрощения задачи. Для упрощенных алгоритмов расчета они характеризуют возможности модели, за рамки которых нельзя выходить, поскольку модель разработана исходя из этих ограничений. Что касается точных моделей, то возможность принятия различных допущений учитывается заранее при разработке общей вычислительной схемы, характеризующей многовариантность постановки задачи расчета. При модульной структуре модели снятие того или иного допущения приводит к необходимости включения в состав соответствующего модуля, и наоборот, принятие допущения упрощает вычислительную схему алгоритма и состоит в исключении модуля, ответственного за допущение.

Имеется несколько причин принятия допущений при расчете процессов химической технологии, а именно: узкая область применения алгоритма, обусловленная его несовершенством или специализацией; отсутствие математического описания явления, определяющего данное допущение, а также низкая эффективность работы общего алгоритма по быстродействию, скорости сходимости и по объему занимаемой памяти.

Допущения принимаются при формулировании задачи расчета и входят в математическое описание отдельных составляющих процесса. Рассмотрим состав математической модели ректификационной установки и обычно принимаемые допущения отно-

сительно отдельных блоков. Ее элементами являются: алгоритм решения системы уравнений материального и теплового балансов, алгоритмы расчета фазового равновесия, алгоритмы расчета кинетики массопередачи и гидродинамики потоков, алгоритмы расчета теплообменной аппаратуры. С каждым из элементов связаны допущения, снятие которых приводит к появлению нового варианта расчета процесса. Отдельные варианты расчета помимо указанных возникают и при задании различных наборов независимых переменных, так что многовариантность зависит не только от возможности принятия допущений. Обычно вариант расчета формируется исходя из постановки задачи и наличия исходных данных. Для этого из библиотеки выбираются необходимые модули (по указанию пользователя или автоматически), которые и составляют вычислительную схему решения задачи.

Относительно алгоритмов решения уравнений баланса обычно принимается, что потоки пара (газа) и жидкости постоянны по высоте отдельных секций колонны. Такое допущение исключает необходимость решения уравнений теплового баланса и приемлемо в тех случаях, когда теплоты парообразования отдельных компонентов смеси имеют одинаковый порядок. Совершенство алгоритма решения уравнений баланса в значительной степени определяет универсальность модели. Однако часто уже при постановке задачи вводятся ограничения, которые определяют область его применения. Это, например, расчет только простых колонн, неучет кинетики массопередачи и т. д.

Многообразие вариантов расчета фазового равновесия обусловлено значительным различием свойств разделяемой смеси. Это различие находит отражение в алгоритмах расчета фазового равновесия. Применительно к массообменным процессам в настоящее время накоплен достаточный опыт по расчету равновесия в идеальных и неидеальных системах, однако применение точных моделей часто обусловлено отсутствием экспериментальных данных для оценки параметров корреляционных зависимостей типа уравнений Вильсона и НРТЛ для учета неидеальности жидкой фазы или вириального уравнения для оценки неидеальности паровой фазы. Отсутствие данных приводит к тому, что при расчетах принимаются упрощающие допущения, оценка которых даже не всегда возможна. К распространенным допущениям относительно расчета фазового равновесия относятся: паровая (газовая) фаза подчиняется законам идеальных газов, что позволяет отказаться от учета неидеальности и обычно принимается для систем в диапазоне умеренных давлений; жидкая фаза подчиняется законам идеальных растворов, что позволяет отказаться от учета неидеальности и определять константы равновесия через давление паров чистых компонентов (это допущение обычно принимается при определении равновесия систем, состоящих из компонентов с близкими свойствами, например членов

пература, и если она не отличается от значения на предыдущей итерации, то вычисления прекращаются, в противном случае цикл вычислений повторяется при скорректированном значении температуры. Алгоритм расчета равновесия системы жидкость—жидкость—пар приведен на рис. 7.14.

7.3.2. Алгоритмы расчета массообменных аппаратов

В настоящее время известно большое количество алгоритмов расчета массообменных процессов (ректификация, экстракция, абсорбция, адсорбция и т.д.), отличающихся степенью детализации отдельных элементов, но, по сути, предназначенных для решения систем уравнений материального и теплового баланса, нелинейность которых зависит от точности описания парожидкостного равновесия, кинетики массопередачи, гидродинамики потоков. Объем входной информации зависит от точности модели, однако выходная информация подавляющего большинства алгоритмов практически одинаковая — профили концентраций, потоков и температур по высоте аппарата и составы целевых продуктов. Правда, соответствие результатов расчета реальным данным будет определяться тем, насколько точно в модели воспроизведены реальные условия.

Ограничения, принимаемые при расчете массообменных аппаратов. При расчете колонн ограничения или допущения обычно принимаются для упрощения задачи. Для упрощенных алгоритмов расчета они характеризуют возможности модели, за рамки которых нельзя выходить, поскольку модель разработана исходя из этих ограничений. Что касается точных моделей, то возможность принятия различных допущений учитывается заранее при разработке общей вычислительной схемы, характеризуя многовариантность постановки задачи расчета. При модульной структуре модели снятие того или иного допущения приводит к необходимости включения в состав соответствующего модуля, и наоборот, принятие допущения упрощает вычислительную схему алгоритма и состоит в исключении модуля, ответственного за допущение.

Имеется несколько причин принятия допущений при расчете процессов химической технологии, а именно: узкая область применения алгоритма, обусловленная его несовершенством или специализацией; отсутствие математического описания явления, определяющего данное допущение, а также низкая эффективность работы общего алгоритма по быстродействию, скорости сходимости и по объему занимаемой памяти.

Допущения принимаются при формулировании задачи расчета и входят в математическое описание отдельных составляющих процесса. Рассмотрим состав математической модели ректификационной установки и обычно принимаемые допущения отно-

чительно отдельных блоков. Ее элементами являются: алгоритм решения системы уравнений материального и теплового балансов, алгоритмы расчета фазового равновесия, алгоритмы расчета кинетики массопередачи и гидродинамики потоков, алгоритмы расчета теплообменной аппаратуры. С каждым из элементов связаны допущения, снятие которых приводит к появлению нового варианта расчета процесса. Отдельные варианты расчета помимо указанных возникают и при задании различных наборов независимых переменных, так что многовариантность зависит не только от возможности принятия допущений. Обычно вариант расчета формируется исходя из постановки задачи и наличия исходных данных. Для этого из библиотеки выбираются необходимые модули (по указанию пользователя или автоматически), которые в совокупности вычислительную схему решения задачи.

Относительно алгоритмов решения уравнений баланса обычно принимается, что потоки пара (газа) и жидкости постоянны по высоте отдельных секций колонны. Такое допущение исключает необходимость решения уравнений теплового баланса и приемлемо в тех случаях, когда теплоты парообразования отдельных компонентов смеси имеют одинаковый порядок. Совершенство алгоритма решения уравнений баланса в значительной степени определяет универсальность модели. Однако часто уже при постановке задачи вводятся ограничения, которые определяют область его применения. Это, например, расчет только простых колонн, учет кинетики массопередачи и т. д.

Многообразие вариантов расчета фазового равновесия обусловлено значительным различием свойств разделяемой смеси. Это различие находит отражение в алгоритмах расчета фазового равновесия. Применительно к массообменным процессам в настоящее время накоплен достаточный опыт по расчету равновесия в идеальных и неидеальных системах, однако применение точных моделей часто обусловлено отсутствием экспериментальных данных для оценки параметров корреляционных зависимостей типа уравнений Вильсона и НРТЛ для учета неидеальности жидкой фазы или вириального уравнения для оценки неидеальности паровой фазы. Отсутствие данных приводит к тому, что при расчетах принимаются упрощающие допущения, оценка которых даже не всегда возможна. К распространенным допущениям относительно расчета фазового равновесия относятся: паровая (газовая) фаза подчиняется законам идеальных газов, что позволяет отказаться от учета неидеальности и обычно принимается для систем в диапазоне умеренных давлений; жидкая фаза подчиняется законам идеальных растворов, что позволяет отказаться от учета неидеальности и определять константы равновесия через давление паров чистых компонентов (это допущение обычно принимается при определении равновесия систем, состоящих из компонентов с близкими свойствами, например членов

гомологического ряда); коэффициенты относительной летучести не зависят от температуры, что также справедливо для систем с близкими свойствами.

Расчет фазового равновесия является одним из важнейших этапов расчета массообменных процессов, особенно при решении задач проектирования, так как в этом случае определяется принципиальная возможность применения данного процесса для получения заданных продуктов. Поэтому априорное принятие допущений относительно поведения фаз недопустимо, так как может привести к заведомо неверным результатам расчетов. Необходимо не только проводить проверку возможности принятия допущения, но и производить выбор наиболее подходящего с точки зрения воспроизведения экспериментальных данных метода учета неидеальности фаз. В рамках рассматриваемой системы такой выбор соотношений для оценки неидеальности фаз производится на этапе исследования условий фазового равновесия. Например, применение метода функциональных групп позволяет до минимума сократить объем необходимых экспериментальных данных, а в большинстве случаев и вовсе исключить их.

Учет кинетики массопередачи позволяет оценить степень неравновесности на каждой ступени, вызванной несовершенством массообменного элемента или неоптимальным режимом работы или недостаточным временем контакта фаз. Отметим возможные допущения относительно оценки массопередачи и соответствующие варианты расчета, а именно: на каждой ступени разделения достигается равновесие между фазами, т. е. расчет ведется по теоретическим тарелкам; это допущение принимается в тех случаях, когда нет данных по оценке эффективности или необходимо произвести ориентировочную оценку размеров колонны в терминах теоретических тарелок; эффективность разделения оценивается в терминах КПД Мерффи в следующих вариантах: а) КПД Мерффи постоянный по всем компонентам разделяемой смеси и для всех тарелок — допущение, обычно принимаемое при наличии обобщенных экспериментальных данных разделительной способности; б) КПД Мерффи постоянный по всем компонентам, но изменяется по высоте колонны — допущение, принимаемое при оценке разделительной способности на экспериментальных зависимостях через конструктивные и режимные параметры тарелок и колонны; эффективность разделения оценивается в терминах КПД испарения — допущение, приводящее к тому, что кинетика массопередачи не участвует в расчетах, а КПД определяется чисто формально.

Рассмотренные допущения относительно кинетики массопередачи приводят к тому, что не учитываются эффекты многокомпонентной массопередачи, которые, как отмечено ниже, могут быть существенными. Привлекательным для целей проектирования

вания методом оценки разделительной способности является определение необходимого времени пребывания элементов потока для достижения заданной степени равновесия. Такой подход непосредственно связан с оценкой гидродинамической обстановки на тарелках колонны.

Эффективность разделения непосредственно связана со структурой потоков на тарелках. Наличие байпасирующих потоков, застойных зон и обратного заброса фаз приводит к снижению движущей силы процесса массопередачи, и, естественно, учет этих факторов при оценке эффективности безусловно необходим.

Принимаемые допущения относительно гидродинамики потоков в массообменных элементах обусловлены теми моделями структуры, которые используются в данной модели. К наиболее распространенным моделям относятся смешение, вытеснение и диффузионная. Часто оказывается удобнее вместо диффузионной использовать ячеечную исходя из простоты ее машинной реализации. На основе указанных можно использовать любую их комбинацию, получая комбинированные модели, которые позволяют более полно отразить реальную структуру потоков, а именно: зоны смешения, вытеснения, байпасирования, каналообразования и т. д. Принятие той или иной модели имеет целью внесение поправки на оценку эффективности контакта фаз. Наиболее распространенные модели тарельчатых аппаратов и формулы для определения матриц коэффициентов эффективности приведены в гл. 4.

Трудность применения моделей структуры потоков состоит в том, что их параметры определяются по экспериментальным данным, в частности, по кривым отклика. А это предполагает наличие живой модели, что при решении проектных задач часто не представляется возможным. В связи с этим целесообразно при появлении новых конструкций массообменных элементов наряду с оценкой их эффективности по массопередаче устанавливать применимость типовых гидродинамических моделей в зависимости от нагрузок по фазам. Отсутствие таких данных затрудняет выдачу точных результатов по гидродинамике, и поэтому зачастую становится невозможным получить оценки применения различных моделей. Трудно получить и количественные оценки погрешностей от применения тех или иных моделей. Распространенным способом оценки гидродинамических моделей является расчет по предельным моделям, когда можно сделать вывод, что действительные значения находятся между граничными значениями.

Проектный расчет массообменных процессов. Основная задача проектирования состоит в поиске решения, оптимального в смысле некоторого критерия. В связи с удорожанием природных источников энергии остро встает вопрос разработки энергетически эффективных процессов. Ректификация является одним

гомологического ряда); коэффициенты относительной летучести не зависят от температуры, что также справедливо для систем с близкими свойствами.

Расчет фазового равновесия является одним из важнейших этапов расчета массообменных процессов, особенно при решении задач проектирования, так как в этом случае определяется принципиальная возможность применения данного процесса для получения заданных продуктов. Поэтому априорное принятие допущений относительно поведения фаз недопустимо, так как может привести к заведомо неверным результатам расчета. Необходимо не только проводить проверку возможности принятия допущения, но и производить выбор наиболее подходящего с точки зрения воспроизведения экспериментальных данных метода учета неидеальности фаз. В рамках рассматриваемой системы такой выбор соотношений для оценки неидеальности фаз производится на этапе исследования условий фазового равновесия. Например, применение метода функциональных групп позволяет до минимума сократить объем необходимых экспериментальных данных, а в большинстве случаев и вовсе исключить их.

Учет кинетики массопередачи позволяет оценить степень неравновесности на каждой ступени, вызванной несовершенством массообменного элемента или неоптимальным режимом работы или недостаточным временем контакта фаз. Отметим возможные допущения относительно оценки массопередачи и соответствующие варианты расчета, а именно: на каждой ступени разделения достигается равновесие между фазами, т. е. расчет ведется по теоретическим тарелкам; это допущение принимается в тех случаях, когда нет данных по оценке эффективности или необходимо произвести ориентировочную оценку размеров колонны в терминах теоретических тарелок; эффективность разделения оценивается в терминах КПД Мерффи в следующих вариантах: а) КПД Мерффи постоянный по всем компонентам разделяемой смеси и для всех тарелок — допущение, обычно принимаемое при наличии обобщенных экспериментальных данных разделительной способности; б) КПД Мерффи постоянный по всем компонентам, но изменяется по высоте колонны — допущение, принимаемое при оценке разделительной способности по экспериментальным зависимостям через конструктивные и режимные параметры тарелок и колонны; эффективность разделения оценивается в терминах КПД испарения — допущение, приводящее к тому, что кинетика массопередачи не участвует в расчетах, а КПД определяется чисто формально.

Рассмотренные допущения относительно кинетики массопередачи приводят к тому, что не учитываются эффекты многокомпонентной массопередачи, которые, как отмечено ниже, могут быть существенными. Привлекательным для целей проектирования

нация методом оценки разделительной способности является определение необходимого времени пребывания элементов потока для достижения заданной степени равновесия. Такой подход непосредственно связан с оценкой гидродинамической обстановки на тарелках колонны.

Эффективность разделения непосредственно связана со структурой потоков на тарелках. Наличие байпасирующих потоков, мертвых зон и обратного заброса фаз приводит к снижению движущей силы процесса массопередачи, и, естественно, учет этих факторов при оценке эффективности безусловно необходим.

Принимаемые допущения относительно гидродинамики потоков в массообменных элементах обусловлены теми моделями структуры, которые используются в данной модели. К наиболее распространенным моделям относятся смешение, вытеснение и диффузионная. Часто оказывается удобнее вместо диффузионной использовать ячеечную исходя из простоты ее машинной реализации. На основе указанных можно использовать любую их комбинацию, получая комбинированные модели, которые позволяют более полно отразить реальную структуру потоков, а именно: зоны смешения, вытеснения, байпасирования, каналаобразования и т. д. Принятие той или иной модели имеет целью внесение поправки на оценку эффективности контакта фаз. Наиболее распространенные модели тарельчатых аппаратов и формулы для определения матриц коэффициентов эффективности приведены в гл. 4.

Трудность применения моделей структуры потоков состоит в том, что их параметры определяются по экспериментальным данным, в частности, по кривым отклика. А это предполагает наличие живой модели, что при решении проектных задач часто не представляется возможным. В связи с этим целесообразно при появлении новых конструкций массообменных элементов наряду с оценкой их эффективности по массопередаче устанавливать применимость типовых гидродинамических моделей в зависимости от нагрузок по фазам. Отсутствие таких данных затрудняет выдачу точных результатов по гидродинамике, и поэтому подчас становится невозможным получить оценки применения различных моделей. Трудно получить и количественные оценки погрешностей от применения тех или иных моделей. Распространенным способом оценки гидродинамических моделей является расчет по предельным моделям, когда можно сделать вывод, что действительные значения находятся между граничными значениями.

Проектный расчет массообменных процессов. Основная задача проектирования состоит в поиске решения, оптимального в смысле некоторого критерия. В связи с удорожанием природных источников энергии остро встает вопрос разработки энергетически эффективных процессов. Ректификация является одним

из наиболее энергоемких процессов с низким коэффициентом использования энергии (по некоторым оценкам эффективность колонны по энергии составляет величину порядка 2,5—10% [50]). Поэтому снижение энергозатрат для данного процесса является актуальной задачей.

При проектировании ректификационных установок проблема поиска оптимального решения связана с установлением баланса между капитальными и эксплуатационными расходами в термодинамическом и экономическом критериях. Хотя экономические критерии не позволяют выявить путей снижения энергии на ведение процесса (в отличие, например, от термодинамического), они широко используются в практике проектирования как удобный способ сравнительной оценки вариантов проекта. Речь идет о выявлении новых способов снижения потерь энергии. Такие возможности могут быть выявлены в результате исследования самого процесса. В рамках же известных способов экономические критерии позволяют отыскать оптимальное решение.

Известно, что доминирующей статей расходов на ведение процесса ректификации являются эксплуатационные расходы. Среди их отдельных статей большая часть приходится на организацию парового потока, подогрев и охлаждение целевых и промежуточных потоков. Поэтому для создания энергетически оптимального варианта проекта необходимо вести процесс при минимальной флегме, пониженном давлении и большем числе тарелок. Требуемая разделительная способность колонны может быть достигнута за счет увеличения флегмового числа при меньшем числе тарелок (или малой высоте слоя насадки) или при увеличении числа тарелок (высоты колонны), но с малой флегмой. С точки зрения энергетики важно установить минимальное флегмовое число, которое бы обеспечивало заданное качество продуктов разделения. Эта величина может быть определена путем минимизации экономического критерия оптимальности.

Пусть критерий оптимальности имеет вид [51]

$$P = 1 - u - s, \quad (7.135)$$

где u — товарная стоимость продуктов; s — суммарные затраты на организацию процесса — капитальные и эксплуатационные затраты, для которых функциональную зависимость от флегмового числа можно выразить следующим образом:

$$s_1 = a / (R - R_{\min}); \quad (7.136)$$

$$s_2 = bR + c, \quad (7.137)$$

где a , b , c — константы. Тогда

$$s = a / (R - R_{\min}) + bR + c, \quad (7.138)$$

а оптимальное значение флегмового числа равно

$$ds/dR = -a / (R - R_{\min})^2 + b = 0, \quad (7.139)$$

т. е.

$$R = R_{\min} + (a/b)^{0.5}. \quad (7.140)$$

Отсюда следует, что оптимальное в смысле экономического критерия флегмовое число близко к минимальному. Тенденция к уменьшению рабочего флегмового числа свидетельствует о неуклонном снижении его и все большего приближения к минимальному [51]. Если в 1960 г. рабочее флегмовое число в среднем по промышленности было равно $R = 1,4R_{\min}$ при средних затратах на процесс $200 \cdot 10^3$ долл./год, то в 1975 г. ректификация проводилась практически при минимальном флегмовом числе при затратах на процесс $400 \cdot 10^3$ долл./год. Эти цифры красноречиво свидетельствуют о все возрастающей стоимости энергетик и о необходимости поиска путей снижения энергетических затрат на ведение процесса.

Оптимальное по экономическому критерию флегмовое число можно найти, если воспользоваться записью критерия через отдельные статьи расходов на ведение процесса ректификации. В качестве обобщенного показателя экономической эффективности производства часто используется так называемый приведенный доход

$$D_{\text{пр}} = \sum_j C_j V_j - Z_0 - E_{\text{н}} Z_{\text{к}}, \quad (7.141)$$

где C_j — отпускная цена на продукт j -го вида; V_j — годовой объем выпуска и реализации j -го вида конечного продукта; $E_{\text{н}}$ — нормативный коэффициент отрасли; Z_0 — эксплуатационные затраты; $Z_{\text{к}}$ — капитальные затраты.

Анализ этого выражения показывает, что приведенный доход обеспечивает соизмерение всех основных факторов экономической эффективности, а именно, количества и качества реализуемой продукции, эксплуатационных и капитальных затрат.

При решении задач проектирования обычно заданными являются объем выпускаемой продукции и ее качество. Тогда условие максимума приведенного дохода становится адекватным минимуму приведенных затрат, т. е.

$$Z_{\text{пр}} = Z_0 + E_{\text{н}} Z_{\text{к}}. \quad (7.142)$$

Эксплуатационные затраты на химическом предприятии складываются, как правило, из затрат на сырье $Z_{\text{с}}$, энергию $Z_{\text{эн}}$ и вспомогательные материалы $Z_{\text{вм}}$, заработной платы $Z_{\text{зп}}$, амортизационных отчислений и затрат на ремонт $Z_{\text{ам}} + Z_{\text{рем}}$, а также цеховых и общезаводских расходов $Z_{\text{ц}}$. Учитывая, что удельный вес заработной платы в структуре себестоимости мал, эти затраты, так же как и общезаводские и цеховые расходы, могут быть приняты независимыми от структуры системы разделения и режи-

ма работы установки. Тогда

$$Z_0 = Z_{эн} + Z_{ам} + Z_{рем} + Z_{вм} + C, \quad (7.143)$$

где $C = Z_{эн} + Z_c + Z_n = \text{const}$. Амортизационные отчисления и затраты на ремонт определяют как долю капитальных затрат:

$$Z_{ам} + Z_{рем} = (H_0 + H_p) Z_k, \quad (7.144)$$

где H_{0i} , H_{pi} — годовые нормы отчислений соответственно на обновление и ремонт i -го вида оборудования. Постоянная C не влияет на положение оптимума целевой функции, а только сказывается на ее величине. Поэтому в качестве критерия оптимальности может быть использована следующая функция:

$$Z_{пр} = Z_{эн} + Z_{вм} + (E_n + H_0 + H_p) Z_k, \quad (7.145)$$

где принято, что годовые нормы отчислений для всех видов оборудования одинаковы.

Для ректификационных установок определяющими в эксплуатационных расходах являются расходы на греющий пар и хладагент, которые через флегмовое число могут быть выражены следующим образом:

$$Z_0 = C_1 V/D = C_1(1 + R), \quad (7.146)$$

где C_1 — стоимость пара и хладагента.

Капитальные затраты, включая амортизацию, прибыль и накладные расходы, выражаются следующим образом [52]:

$$Z_k = C_2 A_1 N/(E\theta D), \quad (7.147)$$

где C_2 — годовая стоимость колонны; A_1 — поперечное сечение колонны, равное

$$A_1 = V/V_1;$$

N — число теоретических тарелок; E — КПД тарелок; θ — период окупаемости производства; D — количество дистиллята; V_1 — допустимая скорость пара; V — расход пара, выражаемый через флегмовое число следующим образом:

$$V = D(1 + R). \quad (7.148)$$

Для кипятыльника и конденсатора можно записать

$$Z_{то} = C_3 A_2 / (\theta D), \quad (7.149)$$

где C_3 — годовая стоимость теплообменного оборудования, включая амортизацию и прибыль; A_2 — поверхность теплообмена. Последняя с учетом того, что $A_2 = V/V_2$, где V_2 — паровая емкость кипятыльника и конденсатора, через флегмовое число выражается следующим образом:

$$A_2 = D(R + 1)/(\theta V_2). \quad (7.150)$$

с учетом (7.148) и (7.150) капитальные затраты на колонну теплообменное оборудование выражаются как

$$Z_k = C_2 N(R + 1)/(E\theta V_1) + C_3(1 + R)/(\theta V_2). \quad (7.151)$$

Тогда общие затраты будут равны

$$Z_{пр} = (1 + R)[C_2 N/(E\theta V_1) + C_3/(\theta V_2) + C_1]. \quad (7.152)$$

Если учесть, что число тарелок является функцией флегмового числа, то для оптимального флегмового числа будем иметь

$$\frac{\partial Z_{пр}}{\partial R} = \frac{C_2 N}{E\theta V_1} + \left[\frac{C_2}{E\theta V_1} (1 + R) \frac{dV}{dR} \right] + \frac{C_3}{\theta V_2} + C_1, \quad (7.153)$$

или

$$(1 + R_{опт}) = \frac{N + F}{-dN/dR}, \quad (7.154)$$

где $F = (C_1 + C_3/(\theta V_2))(E\theta V_1/C_2)$.

Таким образом, оптимальное флегмовое число является функцией числа тарелок, стоимостных показателей и эффективности ступени контакта. Для его определения необходимо найти выражение производной dN/dR , что может быть выполнено путем многократных расчетов колонны при различных сочетаниях N и R с последующей аппроксимацией зависимости $N = f(R)$.

Как следует из выражения (7.154), оптимальные условия работы ректификационной установки могут быть получены в результате многократных расчетов, для чего можно использовать как модели в проектной, так и в проверочном вариантах расчета. По существу, поиск оптимума ведется по двум переменным — числу тарелок и флегмовому числу. Третьим параметром, непосредственно влияющим на разделительную способность колонны, является местоположение ввода питания.

Для оценки разделительной способности колонны удобно использовать термодинамический коэффициент полезного действия, определяемый как отношение работы, затраченной на разделение смеси, к полной работе разделения смеси на чистые компоненты. Термодинамический КПД при допущении равенства температур конечных продуктов разделения и температуры исходной смеси определяется выражением [53, 54]

$$\eta_r = 1 - \frac{\sum_i W_i \sum_j x_{ij} \ln(\gamma_{ij} x_{ij})}{F \sum_j x_{Fj} \ln(\gamma_{Fj} x_{Fj})}. \quad (7.155)$$

Можно также воспользоваться производной от (7.155)

$$K_t = \frac{1}{1 - \eta_r} = \frac{F \sum_j x_{Fj} \ln(\gamma_{Fj} x_{Fj})}{\sum_i W_i \sum_j x_{ij} \ln(\gamma_{ij} x_{ij})}, \quad (7.156)$$

ными образованиями: вектором значений свойств, представляемых константами Γ_k , матрицей коэффициентов аппроксимирующих соотношений для свойств, зависящих от температуры и давления Γ_T , а также матрицей коэффициентов зависимостей, описывающих фазовое равновесие $\Gamma_{\phi.p}$:

$$\Gamma = \Gamma(\Gamma_k, \Gamma_T, \Gamma_{\phi.p}). \quad (7.158)$$

Вектор Γ_k содержит значения кригических параметров, температуры, давления, плотности и коэффициента сжимаемости, а также таких параметров, как молекулярный вес, нормальная температура кипения, фактор ацентричности и т. д. Компоненты вектора Γ_k для смеси являются функцией состава.

Элементы вектора Γ_T и элементы матрицы $\Gamma_{\phi.p}$ также являются функциями состава смеси. Таким образом, комплекс физико-химических свойств потока является функцией температуры, давления и состава смеси:

$$\Gamma = \Gamma(X, T, P). \quad (7.159)$$

Смесь, представляющая продуктовые потоки, содержит практически одни и те же компоненты различного состава, но при различных температурах и давлениях (потоки 1, 4, 5, 10 и т. д.). Поэтому физико-химические свойства этих потоков различны, но имеют единые исходные данные для их расчета — свойства индивидуальных компонентов. Ряд потоков, находящихся при одинаковых температурах и давлениях (потоки 9, 10, 11 и 5, 6), различаются расходами. Тепло- и холодоагенты, используемые в теплообменных аппаратах, могут быть как однотипными, так и разнотипными. Отмеченные свойства потоков позволяют подойти к формированию параметров с единых позиций в смысле представления данных и расчетных алгоритмов.

Обычно в задании на проектирование известны параметры состояния входного потока (поток 1)

$$PRP_1 = PRP(T_{вх}, P_{вх}, C_{вх}, X_{вх}, \Gamma_1(T_{вх}, X_{вх})), \quad (7.160)$$

а также температура, давление, расход и состав по одному или нескольким компонентам выходных потоков (потоки 2 и 3)

$$PRP_2 = PRP(T_{2\text{ вых}}, P_{2\text{ вых}}, C_{2\text{ вых}}, X_2, \Gamma_2(T_{2\text{ вых}}, X_{2\text{ вых}})); \quad (7.161)$$

$$PRP_3 = PRP(T_{3\text{ вых}}, P_{3\text{ вых}}, C_{3\text{ вых}}, X_3, \Gamma_3(T_{3\text{ вых}}, X_{3\text{ вых}})), \quad (7.162)$$

где полные составы конечных продуктов X_2 и X_3 неизвестны.

Состояние потока питания (поток 4) можно принять известным, если задаться агрегатным состоянием питания, т. е. температурой. Что касается внутренних потоков установки, параметры которых определяют способ ее функционирования, то задачей расчета является как раз их определение. Решение этой задачи существенно упрощается, если принять, что: температура пара,

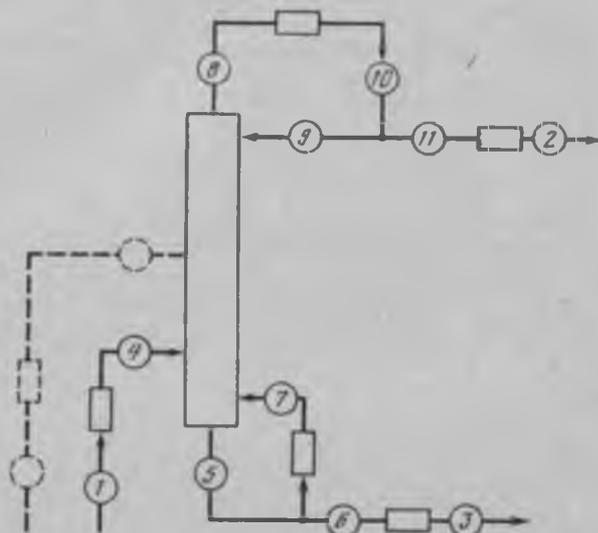


Рис. 7.15. Схема потоков в ректификационной колонне

изменяющейся в диапазоне от 1 до ∞ и, как следствие, более чувствительной к изменению режима работы колонны [54]. Эта величина определяет, во сколько раз данная установка снижает минимально необходимую работу разделения смеси на чистые компоненты, и может формально рассматриваться как термодинамический коэффициент разделения установки. Критерий (7.156) удобно использовать при определении положения ввода питания по высоте колонны.

Прежде чем перейти непосредственно к описанию последовательности проектного расчета ректификационной установки, рассмотрим характеристики потоков, соединяющих отдельные элементы (рис. 7.15). Каждый из потоков характеризуется определенным набором параметров и переменных, значения которых обеспечивают информационную полноту данных о состоянии потока. Совокупность таких параметров и переменных целесообразно объединить в комплекс состояния потока

$$PRP = PRP(T, P, X, G, G), \quad (7.157)$$

где T — температура потока; P — давление; X — вектор состава потока; G — комплекс физико-химических свойств; G — расход потока.

Элементы вектора состава представляют собой концентрации компонентов смеси потока. Комплекс физико-химических свойств потока является одним из основных параметров, определяющих состояние потока. Он характеризуется тремя матри-

цами образования: вектором значений свойств, представляемых константами Γ_k , матрицей коэффициентов аппроксимирующих соотношений для свойств, зависящих от температуры и давления Γ_T , а также матрицей коэффициентов зависимостей, описывающих фазовое равновесие $\Gamma_{f.p}$:

$$\Gamma = \Gamma(\Gamma_k, \Gamma_T, \Gamma_{f.p}). \quad (7.158)$$

Вектор Γ_k содержит значения критических параметров, температуры, давления, плотности и коэффициента сжимаемости, а также таких параметров, как молекулярный вес, нормальная температура кипения, фактор ацентричности и т. д. Компоненты вектора Γ_k для смеси являются функцией состава.

Элементы вектора Γ_T и элементы матрицы $\Gamma_{f.p}$ также являются функциями состава смеси. Таким образом, комплекс физико-химических свойств потока является функцией температуры, давления и состава смеси:

$$\Gamma = \Gamma(X, T, P). \quad (7.159)$$

Смесь, представляющая продуктивные потоки, содержит практически одни и те же компоненты различного состава, но при различных температурах и давлениях (потоки 1, 4, 5, 10 и т. д.). Поэтому физико-химические свойства этих потоков различны, но имеют единые исходные данные для их расчета — свойства индивидуальных компонентов. Ряд потоков, находящихся при одинаковых температурах и давлениях (потоки 9, 10, 11 и 5, 6), различаются расходами. Тепло- и холодоагенты, используемые в теплообменных аппаратах, могут быть как однотипными, так и разнотипными. Отмеченные свойства потоков позволяют подойти к формированию параметров с единых позиций в смысле представления данных и расчетных алгоритмов.

Обычно в задании на проектирование известны параметры состояния входного потока (поток 1)

$$PRP_1 = PRP(T_{вх}, P_{вх}, C_{вх}, X_{вх}, \Gamma_1(T_{вх}, X_{вх})), \quad (7.160)$$

а также температура, давление, расход и состав по одному или нескольким компонентам выходных потоков (потоки 2 и 3)

$$PRP_2 = PRP(T_2_{вых}, P_2_{вых}, C_2_{вых}, X_2, \Gamma_2(T_2_{вых}, X_2_{вых})); \quad (7.161)$$

$$PRP_3 = PRP(T_3_{вых}, P_3_{вых}, C_3_{вых}, X_3, \Gamma_3(T_3_{вых}, X_3_{вых})), \quad (7.162)$$

где полные составы конечных продуктов X_2 и X_3 неизвестны.

Состояние потока питания (поток 4) можно принять известным, если задаться агрегатным состоянием питания, т. е. температурой. Что касается внутренних потоков установки, параметры которых определяют способ ее функционирования, то задачей расчета является как раз их определение. Решение этой задачи существенно упрощается, если принять, что: температура пара,

Величины потоков определяются по уравнениям материального баланса. Таким образом, задача расчета ректификационной установки состоит в определении составов конечных продуктов, величин составов потоков 7 и 8 при заданной высоте колонны.

Параметры состояния потоков тепло- и хладагентов подбираются на основе полученных характеристик соответствующих потоков.

На основе системного подхода к задаче проектирования ректификационной установки можно выделить несколько этапов построения алгоритма решения [55] (рис. 7.16). На первом этапе по заданным параметрам входного потока и агрегатному состоянию питания путем расчета физико-химических свойств смеси обеспечивается информационная полнота комплекса состояния потока питания колонны. Второй этап заключается в определении конструкционных и режимных параметров колонны, обеспечивающих заданную степень разделения по целевому продукту:

$$(N^*, R^*, N_F^*) = f(x_0), \quad (7.163)$$

где x_0 — заданное качество разделения.

Третий этап представляет собой расчет конструкционных элементов колонны. На четвертом этапе с учетом балансовых соотношений рассчитываются физико-химические свойства продуктовых потоков, на основании чего определяются необходимые типоразмеры теплообменной аппаратуры и выбираются тепло- и хладагенты. Расчеты заканчиваются оценкой проекта.

Наиболее сложным для реализации оказывается второй этап, сущность которого заключается в определении соотношения параметров N , R и N_F , позволяющих достигнуть заданной степени разделения. Сложность состоит в том, что практически все известные алгоритмы расчета многокомпонентной ректификации являются итерационными с последовательным уточнением составов по уравнениям материального баланса и потоков — по уравнениям теплового баланса. К тому же в качестве исходных данных необходимо задание конструкционных и режимных параметров (число тарелок N , тарелка ввода питания N_F , флегмовое число R), конечные значения которых при выполнении требований на качество продуктов разделения находятся минимизацией критерия оптимальности типа (7.141). Необходимость многократных расчетов для нахождения оптимального решения является существенным недостатком всех точных моделей. Поэтому любая возможность снижения размерности задачи без потери точности является важной задачей разработки алгоритмов проектного расчета. Ниже рассматривается один из таких алгоритмов, основанный на методе квазилинеаризации.

В общем случае поиск оптимального решения, т. е. такого сочетания переменных N , R и N_F , которые соответствуют минимуму критерия оптимальности при выполнении требований по

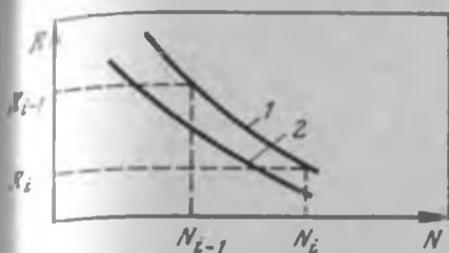


рис. 7.17. Кривые заданного разделения

1 — $R^* = f(N^*, x^*, N^*_F)$; 2 — $R^* = f(N^*, x^*, N^*_F)$

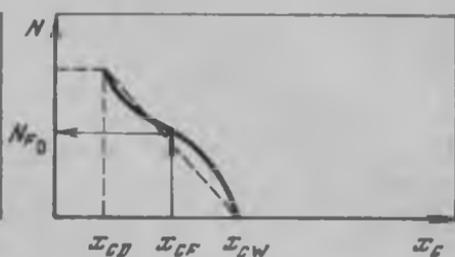


рис. 7.18. Выбор начального приближения по тарелке питания

качеству продуктов разделения, заключается в построении семейства кривых

$$x_0 = x(N^*, R^*, N^*_F) \quad (7.164)$$

и выборе оптимальных значений указанных параметров. Здесь x_0 — заданное качество продуктов разделения. Графическая иллюстрация стратегии поиска приведена на рис. 7.17 и 7.18.

Блок 2 в алгоритме (см. рис. 7.16) обеспечивает получение соотношений между переменными N^* и R^* . Перебор ряда значений флегмового числа с расчетом в каждом случае режима работы колонны устанавливает зависимость

$$x = x(N^*, R). \quad (7.165)$$

Значение флегмового числа, определяющее вторую координату точки кривой заданного разделения, является корнем уравнения

$$x_0 - x(N^*, R) = 0, \quad (7.166)$$

который находится по методу хорд. Для поиска оптимального места ввода питания по термодинамическому критерию (7.156) используется метод, основанный на числах Фибоначчи. Результатом расчета является зависимость $N = F(R)$, используемая для расчета оптимальных параметров в соответствии с (7.154).

Исходными данными для расчета теплообменных аппаратов являются характеристики продуктов, ограничения на типы используемого оборудования, а также некоторые сведения о потоках тепло- и хладагентов: состав, температура и давление на входе в аппарат. Остальные параметры (температура на выходе аппарата и расход хладагента или теплоносителя, а также конструктивные размеры) определяются в результате расчета. Причем их определение производится на основании критерия оптимальности с учетом капитальных и эксплуатационных затрат. Это возможно в результате перебора для каждого рассчитываемого аппарата

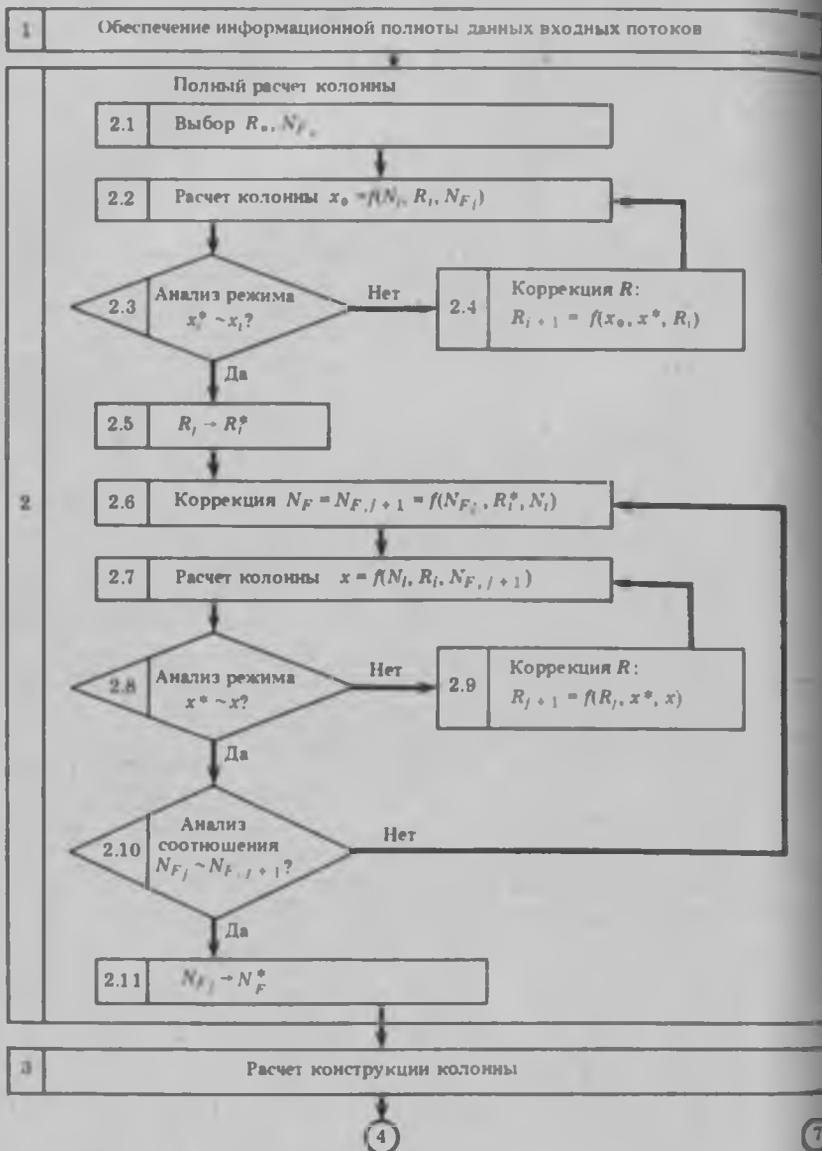
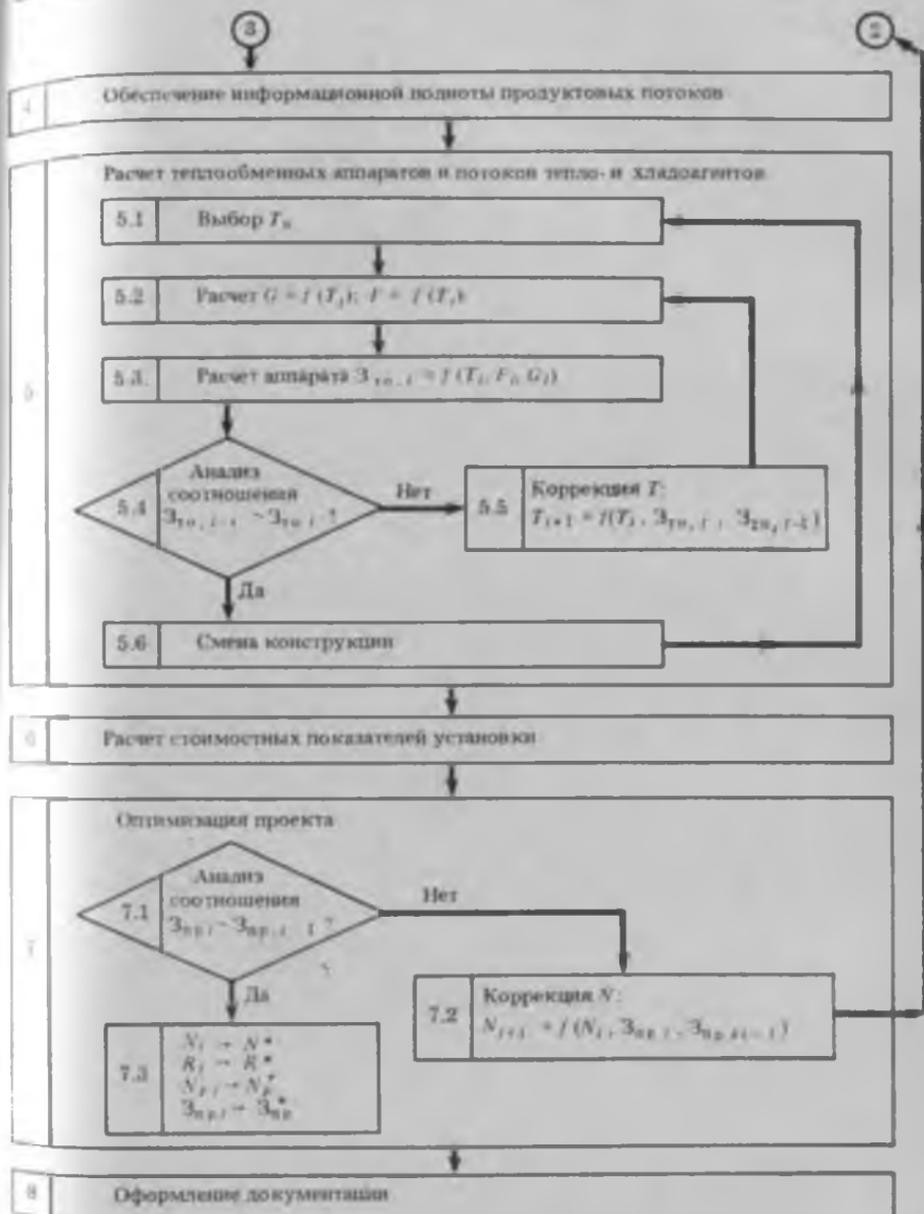


Рис. 7.16. Алгоритм поиска оптимального проектного решения

поступающего в дефлегматор (поток 8), равна температуре кипения жидкости того же состава; температура потока жидкости из куба колонны (поток 5) равна температуре кипения; температура флегмы (потока 9) равна температуре кипения или указывается в задании на проектирование; давление в дефлегматоре указы-



дается в задании на проектирование; давление потоков зависит от типа элементов установки и рассчитывается по известным соотношениям; составы продуктовых потоков верха (потоки 9, 10, 11, 2 и 8 в случае полного конденсатора) и куба (потоки 5, 6, 3) колонны равны.

всех указанных типов и конструкций теплообменников и анализ для каждого варианта величины частного критерия оптимальности при различных значениях температуры на выходе из аппарата и расходах тепло- или хладоагента.

При расчете процессов абсорбции и экстракции задача проектного расчета может ставиться аналогично, если условия неизотермические и имеются рециклы по фазам. Однако для наиболее распространенных вариантов технологического оформления расчет существенно упрощается.

Алгоритм проектного расчета. Как отмечалось ранее, математическое описание колонны представляет собой систему нелинейных алгебраических уравнений высокой размерности, решение которой производится итеративными методами, причем скорость сходимости зависит как от начального приближения, так и от режима работы колонны. Поэтому исключение итеративного расчета по отдельным переменным в процессе поиска оптимального решения позволит существенно сократить объем вычислений. Ниже предлагается метод расчета, основанный на формулировании задачи как системы нелинейных разностных уравнений с граничными условиями, решение которой осуществляется по методу квазилинеаризации с использованием принципа суперпозиции. Особенностью метода является пригодность для расчета колонн любой сложности с учетом всевозможных алгоритмов описания отдельных явлений (фазовое равновесие, кинетика массопердачи и т. д.), а также возможность исключения итерации по поиску флегмового потока, обеспечивающего заданное качество продуктов разделения при известном числе ступеней разделения. Оптимальное положение тарелки питания в смысле некоторого критерия (например, термодинамического или технологического) определяется непосредственно в ходе потарелочного расчета колонны.

Идея метода заключается в следующем [56, 57]. Пусть при расчете ректификационной колонны (рис. 7.15) необходимо обеспечить заданное качество продукта по одному из компонентов, например первому

$$x_{1,1} = l; \quad x_{1,N} = c, \quad (7.167)$$

или обеспечить минимальное отклонение концентраций компонентов по верхнему продукту от заданных значений при фиксированной концентрации одного из компонентов в кубе колонны:

$$x_{1,1} = l; \quad \sum_{i=1}^k (x_{i,N} - c_i)^2 \rightarrow \min. \quad (7.168)$$

Такие требования на качество продуктов разделения являются достаточно общими, поскольку при разделении многокомпонентных смесей обычно ставится задача выделить один из ком-

компонентов или разделить исходную смесь на фракции по некоторой (ключевой) паре компонентов.

Математическим описанием колонны является система уравнений, включающая уравнения баланса общего и покомпонентного, уравнения для фазового равновесия. Уравнения покомпонентного материального баланса тарелок можно рассматривать как систему нелинейных разностных уравнений первого порядка. Неизвестными здесь будут составы и отношение потоков пара и жидкости. Линеаризация системы уравнений производится разложением в ряд Тейлора до членов первого порядка. Для системы нелинейных разностных уравнений первого порядка

$$f_i [x_{1, n+1}, x_{2, n+1}, \dots, x_{l, n+1}, x_{1, n}, x_{2, n}, \dots, x_{l, n}; N] = 0$$

в результате линеаризации будем иметь

$$f_i [X_{j+1}^{(n)}, X_j^{(n)}, N] + Y_{x_i}^{(n+1)} [X_{j+1}^{n+1} - X_{j+1}^{(n)}] + Y_{x_i}^{(n)} [X_j^{(n+1)} - X_j^{(n)}] = 0, \quad (7.169)$$

где X_{j+1}, X_j, f — k -мерные векторы; $Y_x^{(n)}, Y_x^{(n+1)}$ — матрицы частных производных векторов $X^{(n)}$ и $X^{(n+1)}$ размерностью $k \times k$.

Система уравнений (7.169) является уже линейной и неизвестными в ней являются переменные с индексом $n+1$ (где n — номер итерации), значения которых можно определить в соответствии с принципом суперпозиции по формулам

$$x_{l,j}^{(n+1)} = x_{pl}^{(n+1)} + \sum_{l=1}^k A_l^{(n+1)} x_{h_l j}^{(n+1)}, \quad (7.170)$$

$$z_j^{(n+1)} = z_{vj}^{(n+1)} + \sum_{l=1}^k A_l^{(n+1)} z_{h_l j}^{(n+1)}. \quad (7.171)$$

Здесь z — отношение потоков пара и жидкости, через которое можно выразить флегмовое число; индексы p и h используются для обозначения частного и однородных решений.

Для получения частного и однородных решений необходимо задать начальные условия. В качестве таковых могут быть выбраны произвольные ненулевые векторы. Например, при $k=4$ начальные условия для решения уравнений материального баланса приведены в табл. 7.4.

Константы $A_i^{(n+1)}$, входящие в формулы (7.170) и (7.171), вычисляются по заданным граничным условиям, в качестве которых используются условия (7.167) или (7.168) и (4.53), (4.57). При подстановке этих выражений в (7.170) и (7.171) получается линейная относительно искомых коэффициентов система алгебраических уравнений, решение которой может быть выполнено известными методами. После определения коэффициентов $A_i^{(n+1)}$ формулы (7.170) и (7.171) используются для получения решения на $n+1$ -й итерации.

Таблица 7.4

Переменная	Частное решение	Однородное решение			
		1	2	3	4
x_{11}	1	0	0	0	0
x_{12}	0	1	0	0	0
x_{13}	0	0	1	0	0
x_{14}	0	0	0	1	0
z_1	0	0	0	0	1

Таким образом, алгоритм расчета состоит в следующем.

1. На основе исходных данных задаются значения переменных $x_j^{(n)}$, $z_j^{(n)}$ и вычисляются необходимые параметры режима работы.
2. Определяются частное и однородные решения системы уравнений материального баланса.

3. Рассчитываются коэффициенты $A_i^{(n+1)}$ уравнений (7.170) и (7.171) по заданным граничным условиям и уравнениям баланса.

4. Вычисляется общее решение системы уравнений баланса по формулам (7.170) и (7.171). Если это решение соответствует условиям сходимости, то вычисления заканчиваются; в противном случае полученные значения переменных используются в качестве нового приближения для последующей итерации.

Как показывают практические расчеты, метод обладает быстрой и устойчивой сходимостью. Появление колебательности решения возможно в случае невозможности обеспечения заданного качества продуктов при данном количестве тарелок. Следует заметить, что, как и любой метод, основанный на матричных операциях, по сравнению с потарелочными методами он требует при реализации большего объема памяти.

Изменение начальных и граничных условий позволяет использовать метод квазилинеаризации для решения различных расчетных задач. Например, определение профилей концентраций и величины орошения, вычисление составов и потоков в простых и сложных колоннах, расчет колонн со стриппингами и комплексов колонн и т. д. При этом основная сложность заключается в соответствующем согласовании числа уравнений и числа неизвестных, т. е. в обеспечении замкнутости системы. Как правило, скорость сходимости в зависимости от постановки задачи меняется незначительно.

Обобщенный алгоритм расчета ректификационной колонны. На основании представленной общей схемы рассмотрим алгоритм расчета с учетом изменения потоков пара и жидкости по высоте колонны, разделительной способности тарелки в терминах КШД Мерфри, а также неидеальности фаз. Для упрощения расчетных

соотношений рассмотрим колонну с одним вводом питания и без отбора боковых продуктов, снабженную полным конденсатором в кубом, эквивалентным теоретической тарелке. Питание в колонну поступает при температуре кипения. Необходимо определить профили концентраций компонентов, температуры и потоков по высоте, а также положение тарелки питания и флегмовое число, обеспечивающее заданное разделение.

Математическим описанием являются уравнения общего и покомпонентного материального баланса колонны (4.53), (4.57), уравнение теплового баланса (4.56), которое при определении энтальпии смеси как аддитивной величины запишется

$$Q_W + F \sum_i^k x_{F_i} h_{F_i} - Q_D - W \sum_i^k x_{W_i} h_{W_i} - D \sum_i^k x_{D_i} h_{D_i} = 0, \quad (7.172)$$

уравнения баланса по сечению колонны относительно куба

$$L_{j+1} + \lambda F - V_j - W = 0; \quad (7.173)$$

$$L_{j+1} x_{ij+1} + \lambda F x_{F_i} - V_j y_{ij} - W x_{W_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k; \quad (7.174)$$

$$L_{j+1} \sum_i^k x_{ij+1} h_{ij+1} + \lambda F \sum_i x_{F_i} h_{F_i} + Q_W - V_j \sum_i y_{ij} H_{ij} - \\ - W \sum_i x_{W_i} h_{W_i} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N-1, \quad (7.175)$$

где

$$\lambda = \begin{cases} 0 & \text{при } j > NF, \\ 1 & \text{при } j \leq NF \end{cases}$$

равновесное соотношение (4.22) и уравнение для расчета состава пара, покидающего тарелку (4.60).

Уравнения (7.173)–(7.175) и (4.60) составляют систему нелинейных разностных уравнений $2k + 2$ порядка относительно $2k + 2$ неизвестных x_{ij} , y_{ij} , V_j и L_j ($i = 1, 2, \dots, k$). Воспользовавшись уравнением (7.173), соотношением

$$x_{kj} = 1 - \sum_i^{k-1} x_{ij} \quad (7.176)$$

и уравнением (4.22), последнюю можно записать относительно неизвестных x_{ij} и V_j , т. е. в виде

$$g_{ij} = x_{ij+1} \left[1 - \lambda \frac{F}{W} B_j \right] - B_j \sum_i^j K_{ii} x_{ii} E_i \prod_{t=i+1}^j (1 - E_t) - x_{W_i} + \\ + \lambda \frac{F}{W} x_{F_i} = 0, \quad (7.177)$$

$$g_{kj} = x_{kj+1} - x_{kj}; \quad (7.178)$$

где

$$x_{kj} = V_1;$$

$$B_j = \left\{ \left(1 - \lambda \frac{F}{W} \right) \left(\sum_t^{k-1} x_{tj+1} (h_{tj+1} - h_{kj+1}) + h_{kj+1} - \right. \right. \\ \left. \left. - \sum_t^{k-1} x_{Wt} (h_{Wt} - h_W) - h_{Wj} + \lambda \frac{F}{W} \sum_t^k x_{Ft} h_{Ft} + \frac{Q_W}{W} \right) u_j^{-1} \right\}$$

$$u_j = H_{kj} \sum_t^j K_k E_t \prod_{t=l+1}^j (1 - E_t) + \sum_t^{k-1} \sum_t^j x_{tj} [H_{lj} K_{lj} - H_{kj} K_{kt}] \times \\ \times E_t \prod_{t=l+1}^j (1 - E_t) - h_{j+1} - \sum_t^{l-1} x_{tj+1} (h_{tj+1} - h_{j+1});$$

$$Q_W = V_1 \left\{ \sum_t^{l-1} x_{Wt} (K_{Wt} H_{Wt} - K_{Wj} H_{Wj}) + K_W H_{Wj} - h_{Wj} - \right. \\ \left. - \sum_t^j x_{Wt} (h_{Wt} - h_{Wj}) \right\}.$$

Для решения системы уравнений (7.177), (7.178) воспользуемся методом квазилинеаризации. Линеаризация системы уравнений производится по переменным $x_1, x_2, \dots, x_j, V_1$ в соответствии с формулой (7.169), которая в данном случае записывается в виде

$$G^{(n)} + \sum_t^{j+1} Y_{x_t} (X_t^{(n+1)} - X_t^{(n)}) = 0, \quad (7.179)$$

где Y_x — матрицы частных производных k -го порядка; $G^{(n)}$ — вектор правых частей уравнений (7.177) и (7.178). Элементы матрицы вычисляются по формулам

$$\frac{\partial g_{ij}}{\partial x_{Wl}} = \left[x_{ij+1} - \sum_m^j K_{lm} x_{lm} E_m \prod_{t=m+1}^j (1 - E_t) \right] \{ h_{Wj} - h_{Wl} - \\ - \sum_t^{k-1} x_{Wt} \frac{\partial h_{Wt}}{\partial l W} \frac{\partial T_W}{\partial x_{Wl}} + \frac{V_1}{W} [E_W (K_{Wl} H_{Wl} - K_{Wk} H_{Wk} + \\ + \sum_t^{l-1} x_{Wt} K_{Wt} \frac{\partial H_{Wt}}{\partial l W} \frac{\partial T_W}{\partial x_{Wl}}) + h_{Wj} - h_{Wl} - \\ - \sum_t^{l-1} x_{Wt} \frac{\partial h_{Wt}}{\partial l W} \frac{\partial T_W}{\partial x_{Wl}}] \} u_j^{-1} - \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots, k-1;$$

(7.180)

$$\frac{\partial g_{ij}}{\partial V_1} = \frac{Q_W [x_{ij+1} - \sum_l K_{il} x_{il} E_l \prod_{t=l+1}^j (1 - E_t)]}{W u_j V_1} \quad (7.181)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x_{ij}} &= \left[x_{ij+1} - \sum_m K_{im} x_{im} E_m \prod_{t=m+1}^j (1 - E_t) \right] \times \\ &\times \left\{ (H_{ij} K_{ij} - H_{kj} K_{kj}) E_j + \sum_r^{k-1} \frac{\partial H_{rj}}{\partial T_j} \frac{\partial T_j}{\partial x_{ij}} \sum_m^j x_{rm} K_{rm} E_m \times \right. \\ &\times \left. \prod_{j=m+1}^j (1 - E_t) \right\} \frac{B_j}{u_j} - B_j K_{ij} E_j \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots, k-1; \end{aligned} \quad (7.182)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x_{lj+1}} &= \left(1 - \lambda \frac{F}{W} + B_j \right) \left[\delta_{il} + \frac{x_{lj+1} - \sum_m K_{lm} x_{lm} E_m}{u_j} \times \right. \\ &\times \left. \prod_{t=m+1}^j (1 - E_t) \right] (h_{lj+1} - h_{kj+1} + \\ &+ \sum_r^{k-1} x_{rj+1} \frac{\partial h_{rj+1}}{\partial T_{j+1}} \frac{\partial T_{j+1}}{\partial x_{lj+1}}), \quad i = 1, 2, \dots, k-1; \end{aligned} \quad (7.183)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x_{lp}} &= \left[x_{ij+1} - \sum_m K_{im} x_{im} E_m \prod_{t=m+1}^j (1 - E_t) \right] \times \\ &\times \left(-\frac{B_j}{u_j} K_{lp} E_p \prod_{t=p+1}^j (1 - E_t) H_{ij} - B_j K_{lp} E_p \prod_{t=p+1}^j (1 - E_t) \right) \delta_{il}, \\ p &= 1, 2, \dots, N-1. \end{aligned} \quad (7.184)$$

Здесь

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{при } i \neq j; \\ 1 & \text{при } i = j. \end{cases}$$

Для определения $\partial T_j / \partial x_{ij}$ используется выражение

$$K_{kj} + \sum_l^{k-1} x_{lj} (K_{lj} - K_{kj}) - 1 = 0_k \quad (7.185)$$

откуда

$$\frac{\partial T_j}{\partial x_{ij}} = (K_{kj} - K_{ij}) / \left(\sum_l^{k-1} \left[\frac{\partial K_{lj}}{\partial T_j} - \frac{\partial K_{kj}}{\partial T_j} \right] x_{lj} + \frac{\partial K_{kj}}{\partial T_j} \right). \quad (7.186)$$

Формулы (7.180)–(7.184) используются для вычисления частного и однородных решений исходной системы уравнений.

Для определения констант в формулах (7.170) используются граничные условия в виде системы линейных алгебраических уравнений

$$CA = B, \quad (7.185)$$

где

$$B = \begin{cases} C - x_{p1N}, & i = 1; \\ Fx_{Fi} - Dx_{p1N} - Wx_{p1W}, & i = 2, \dots, k; \end{cases}$$

$$C_{ij} = \begin{cases} x_{hiN}, & i = 1; \\ Dx_{hiN} + Wx_{hiW}, & j, i = 2, \dots, k - 1; \end{cases}$$

x_p и x_h — частное и однородные решения соответственно.

Нагрузка на конденсатор рассчитывается по уравнению теплового баланса колонны (7.172). Для расчета потоков пара и жидкости используются уравнения (7.173), (7.175)

$$V_j = [(W - \lambda F) \sum_i^k x_{i,j+1} h_{i,j+1} + \lambda F \sum_i^k x_{Fi} h_{Fi} + Q_W - W \sum_i^k x_{Wi} h_{Wi}] / (\sum_i^k y_{ij} H_{ij} - \sum_i^k x_{i,j+1} h_{i,j+1}), \quad j = 2, 3, \dots, N - 1; \quad (7.188)$$

$$L_{j+1} = V_j + W - \lambda F. \quad (7.189)$$

Для расчета потоков дистиллята D и кубового продукта W используются уравнения (4.53), (4.57), записанные для компонента, концентрация которого в продуктах разделения задана. При известном составе жидкости состав пара определяется по уравнениям (4.22) и (4.59).

Последовательность расчета ректификационной колонны состоит в следующем.

1. Задаются исходные данные: количество и состав питания, число тарелок, свойства компонентов для расчета энтальпий, параметры уравнений для расчета фазового равновесия (в зависимости от применяемой модели для учета неидеальности фаз), КПД тарелок, параметр для оценки точности вычислений, ограничения на качество продуктов разделения и начальные значения температуры и парового потока с первой тарелки.

2. Рассчитываются потоки дистиллята и кубового остатка, задаются начальное распределение концентраций и потоков по высоте, начальное положение тарелки питания.

3. Рассчитываются температуры кипения, константы фазового равновесия, энтальпии потоков, т. е. коэффициенты системы балансовых уравнений.

4. Находятся частное и однородные решения системы урав-

шений при начальных условиях, аналогичных приведенным в табл. 7.4.

5. Определяются элементы матрицы системы уравнений (7.187).

6. Рассчитываются профили концентраций компонентов и величина парового потока с первой тарелки по формулам (7.170), (7.171).

7. Проверяется условие окончания расчетов. Если концентрации компонентов по высоте колонны и поток пара на двух последующих итерациях отличаются на величину, превышающую точность, то после коррекции положения тарелки ввода питания и составов расчеты повторяются с п. 3. В противном случае рассчитывается нагрузка на конденсатор, потоки пара и жидкости по высоте колонны, тем самым завершается расчет режима работы колонны.

Исследование свойств алгоритма проводилось при разделении смесей, содержащих от 3 до 7 компонентов в колоннах с числом тарелок от 10 до 70 с различными интервалами температур кипения компонентов. В табл. 7.5 приведены сравнительные характеристики рассчитанных вариантов.

Таблица 7.5

Вариант	Число тарелок	Тарелка питания	Т _{кип} , °С		Число		
			ЛЛК	ТЛК	итераций	флегмовое	компо- нентов
1	30	15	-11,7	68,7	7	7,897	5
2	50	30	56,5	136,2	6	1,384	4
3	35	17	136,2	215,9	6	5,031	4
4	70	30	64,1	157,3	6	19,26	5
5	10	5	-88,6	68,7	6	1,35	7

Примечание. ЛЛК — легколетучий компонент, ТЛК — труднолетучий компонент.

Интересно отметить, что в процессе исследования алгоритма было выявлено, что при задании нереальных условий разделения наблюдается резкое увеличение количества пара на первых итерациях, однако условия по качеству не выполняются. Последнее обстоятельство является удобным признаком прекращения вычислений или коррекции задания. Было установлено также, что эффективность тарелки практически не влияет на сходимость. Это подтверждают данные, приведенные в табл. 7.6.

Как уже отмечалось, метод может быть использован для расчета сложных колонн и их комплексов. При этом возможно задание качества продуктов по любому количеству потоков. Метод достаточно эффективен и при решении вариантов задач в проверочной постановке. Нельзя утверждать, что он является универсаль-

Формулы (7.180)—(7.184) используются для вычисления частного и однородных решений исходной системы уравнений.

Для определения констант в формулах (7.170) используются граничные условия в виде системы линейных алгебраических уравнений

$$CA = B, \quad (7.185)$$

где

$$B = \begin{cases} C - x_{piN}, & i = 1; \\ Fx_{Fi} - Dx_{piN} - Wx_{piW}, & i = 2, \dots, k; \end{cases}$$

$$C_{ij} = \begin{cases} x_{hijN}, & i = 1; \\ Dx_{hijN} + Wx_{hijW}, & j, i = 2, \dots, k - 1; \end{cases}$$

x_p и x_h — частное и однородные решения соответственно.

Нагрузка на конденсатор рассчитывается по уравнению теплового баланса колонны (7.172). Для расчета потоков пара и жидкости используются уравнения (7.173), (7.175)

$$V_j = [(W - \lambda F) \sum_1^k x_{ij+1} h_{ij+1} + \lambda F \sum_1^k x_{Fi} h_{Fi} + Q_W - W \sum_1^k x_{Wi} h_{Wi} - (\sum_1^k v_{ij} H_{ij} - \sum_1^k x_{ij+1} h_{ij+1})], \quad j = 2, 3, \dots, N - 1; \quad (7.186)$$

$$L_{j+1} = V_j + W - \lambda F. \quad (7.187)$$

Для расчета потоков дистиллята D и кубового продукта используются уравнения (4.53), (4.57), записанные для компонента, концентрация которого в продуктах разделения задана. При известном составе жидкости состав пара определяется уравнениями (4.22) и (4.59).

Последовательность расчета ректификационной колонны состоит в следующем.

1. Задаются исходные данные: количество и состав питания, число тарелок, свойства компонентов для расчета энтальпий, параметры уравнений для расчета фазового равновесия (в зависимости от применяемой модели для учета неидеальности фаз), КПД тарелок, параметр для оценки точности вычислений, ограничения на качество продуктов разделения и начальные значения температуры и парового потока с первой тарелки.

2. Рассчитываются потоки дистиллята и кубового остатка, задаются начальное распределение концентраций и потоков по высоте, начальное положение тарелки питания.

3. Рассчитываются температуры кипения, константы фазового равновесия, энтальпии потоков, т. е. коэффициенты системы балансовых уравнений.

4. Находятся частное и однородные решения системы урав-

нений при начальных условиях, аналогичных приведенным в табл. 7.4.

5. Определяются элементы матрицы системы уравнений (7.187).

6. Рассчитываются профили концентраций компонентов и величина парового потока с первой тарелки по формулам (7.170), (7.171).

7. Проверяется условие окончания расчетов. Если концентрации компонентов по высоте колонны и поток пара на двух последних итерациях отличаются на величину, превышающую точность, то после коррекции положения тарелки ввода питания и составов расчеты повторяются с п. 3. В противном случае рассчитывается нагрузка на конденсатор, потоки пара и жидкости по высоте колонны, тем самым завершается расчет режима работы колонны.

Исследование свойств алгоритма проводилось при разделении смесей, содержащих от 3 до 7 компонентов в колоннах с числом тарелок от 10 до 70 с различными интервалами температур кипения компонентов. В табл. 7.5 приведены сравнительные характеристики рассчитанных вариантов.

Таблица 7.5

Вариант	Число тарелок	Тарелка питания	T _{кип} , °C		Число		
			ЛЛК	ТЛК	итераций	флегмовое	компонентов
1	30	15	-11,7	68,7	7	7,897	5
2	50	30	56,5	136,2	6	1,384	4
3	35	17	136,2	215,9	6	5,031	4
4	70	30	64,1	157,3	6	19,26	5
5	10	5	-88,6	68,7	6	1,35	7

Примечание. ЛЛК — легколетучий компонент, ТЛК — труднолетучий компонент.

Интересно отметить, что в процессе исследования алгоритма было выявлено, что при задании нереальных условий разделения наблюдается резкое увеличение количества пара на первых итерациях, однако условия по качеству не выполняются. Последнее обстоятельство является удобным признаком прекращения вычислений или коррекции задания. Было установлено также, что эффективность тарелки практически не влияет на сходимость. Это подтверждают данные, приведенные в табл. 7.6.

Как уже отмечалось, метод может быть использован для расчета сложных колонн и их комплексов. При этом возможно задание качества продуктов по любому количеству потоков. Метод достаточно эффективен и при решении вариантов задач в проверочной постановке. Нельзя утверждать, что он является универсаль-

Таблица 7.6

Вариант	КПД	Число итераций	Вариант	КПД	Число итераций
1	1,0	8	3	0,4	7
2	0,6	7	4	0,2	6

ным, однако в отличие от алгоритмов, основанных на методе Ньютона — Рафсона, он более эффективен при решении задач в проектной постановке, поскольку необходимое флегмовое число определяется в процессе вычислений исходя из требований по качеству продуктов и, по существу, определяется минимальное необходимое флегмовое число, тем самым исключается возможность появления зон постоянных концентраций, наличие которых обычно существенно увеличивает колебательность и затрудняет сходимость решения. Применительно к абсорбции и экстракции расчетные соотношения упрощаются. Однако требования на качество продуктов и в этом случае являются граничными условиями для определения коэффициентов общего решения.

Алгоритм независимого определения концентраций. В отличие от рассмотренного ранее этот метод ориентирован на решение задач в проверочной постановке, т. е. когда известны режимные и конструктивные параметры колонны. Поэтому при использовании его для целей проектирования уточнение необходимых параметров должно проводиться путем проведения многократных расчетов. В методе независимого определения концентраций в качестве независимых переменных выбираются константы фазового равновесия и расчет составов по высоте колонны сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений по каждому из компонентов разделяемой смеси с использованием принципа суперпозиции решений в сочетании со специальным приемом коррекции интервала значений концентраций в процессе расчета [16, 58]. Расчет составов пара и жидкости проводится последовательно снизу вверх по уравнениям баланса, записанным относительно куба колонны. Алгоритм изложен применительно к потарелочному расчету и поэтому является эффективным по объему занимаемой памяти.

Рассмотрим алгоритм расчета колонны, снабженной полным конденсатором и парциальным кипятыльником, с произвольным количеством вводов питания и отбора фракций по высоте колонны (см. рис. 7.15).

Математическим описанием являются равновесное соотношение (4.22), уравнения теплового баланса (4.56), (4.58), уравнения для конденсатора и кипятыльника, соотношение (4.59) для определения состава пара, покидающего данную тарелку, стехиомет-

материальные соотношения и уравнения материального баланса по сечению колонны.

Расчет составов пара и жидкости по высоте колонны производится по формулам, полученным из уравнений баланса и (4.59):

$$y_{ij} = [D_v(1 - E_{ij})y_{i,j-1} + E_{ij}K_{ij}x_{ij} + \gamma]/F_i; \quad (7.190)$$

$$x_{i,j+1} = (V_j y_{ij} + S_F)/L_{j+1}, \quad (7.191)$$

где S_F — количество компонента, вводимого в колонну ниже j -й ступени за вычетом его отбора с фракциями; γ — количество компонента, поступающего на j -ю ступень в паровой фазе; $F_S = V_j + SV_j$; $D_v = F_i - FV_j$.

Расчет составов от куба колонны к конденсатору производится при двух концентрациях компонента в кубе, выбираемых таким образом, чтобы решение заведомо находилось между этими значениями. В качестве таковых принимаются

$${}^{(1)}x_{W_i} = 0, \quad {}^{(2)}x_{W_i} = Fx_{F_i}/W; \quad (7.192)$$

$${}^{(1)}y_{W_i} = 0, \quad {}^{(2)}y_{W_i} = K_{W_i}^{(2)}x_{W_i}. \quad (7.193)$$

В процессе определения концентраций ${}^{(1)}x_{ij}$ и ${}^{(2)}x_{ij}$ возможно получение больших по абсолютной величине значений. Для предотвращения этой ситуации надо проводить контроль на максимально допустимую величину концентрации с последующей коррекцией состава по формулам

$$x_{ij} = (1 + S) {}^{(2)}x_{ij} - S {}^{(1)}x_{ij}; \quad (7.194)$$

$$y_{ij} = (1 + S) {}^{(1)}y_{ij} - S {}^{(2)}y_{ij}; \quad (7.195)$$

где значение параметра S определяется по формулам

$$S = {}^{(2)}x_{im}/({}^{(1)}x_{im} - {}^{(2)}x_{im}) \quad \text{для } {}^{(1)}x_{im}; \quad (7.196)$$

$$S = {}^{(2)}x_{im} - 1/({}^{(1)}x_{im} - {}^{(2)}x_{im}) \quad \text{для } {}^{(2)}x_{im}. \quad (7.197)$$

При известных результатах двух расчетов ${}^{(1)}x_{ij}$ и ${}^{(2)}x_{ij}$ решение находится по формулам (7.194) и (7.195), где

$$S = u_2/(u_1 - u_2); \quad (7.198)$$

$$u_i = V_N {}^{(1)}y_{iN} + W {}^{(1)}x_{W_i} - \sum_j F_j x_{jN}. \quad (7.199)$$

Значения концентраций, полученные на очередной итерации, не могут быть использованы в качестве исходных для последующих расчетов, так как сумма концентраций не равно единице. Поэтому они подвергаются коррекции.

Расчет потоков пара и жидкости по высоте колонны производится путем решения уравнений теплового баланса по известному методу постоянных составов [58].

Алгоритм расчета по методу независимых концентраций состоит в следующем.

Таблица 7.6

Вариант	КПД	Число итераций	Вариант	КПД	Число итераций
1	1,0	8	3	0,4	7
2	0,6	7	4	0,2	6

ным, однако в отличие от алгоритмов, основанных на методе Ньютона — Рафсона, он более эффективен при решении задач в проектной постановке, поскольку необходимое флегмовое число определяется в процессе вычислений исходя из требований по качеству продуктов и, по существу, определяется минимальное необходимое флегмовое число, тем самым исключается возможность появления зон постоянных концентраций, наличие которых обычно существенно увеличивает колебательность и затрудняет сходимость решения. Применительно к абсорбции и экстракции расчетные соотношения упрощаются. Однако требования на качество продуктов и в этом случае являются граничными условиями для определения коэффициентов общего решения.

Алгоритм независимого определения концентраций. В отличие от рассмотренного ранее этот метод ориентирован на решение задач в проверочной постановке, т. е. когда известны режимные и конструктивные параметры колонны. Поэтому при использовании его для целей проектирования уточнение необходимых параметров должно проводиться путем проведения многократных расчетов. В методе независимого определения концентраций в качестве независимых переменных выбираются константы фазового равновесия и расчет составов по высоте колонны сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений по каждому из компонентов разделяемой смеси с использованием принципа суперпозиции решений в сочетании со специальным приемом коррекции интервала значений концентраций в процессе расчета [16, 58]. Расчет составов пара и жидкости проводится последовательно снизу вверх по уравнениям баланса, записанным относительно куба колонны. Алгоритм изложен применительно к потарелочному расчету и поэтому является эффективным по объему занимаемой памяти.

Рассмотрим алгоритм расчета колонны, снабженной полным конденсатором и парциальным кипятыльником, с произвольным количеством вводов питания и отбора фракций по высоте колонны (см. рис. 7.15).

Математическим описанием являются равновесное соотношение (4.22), уравнения теплового баланса (4.56), (4.58), уравнения для конденсатора и кипятыльника, соотношение (4.59) для определения состава пара, покидающего данную тарелку, стехиомет-

рические соотношения и уравнения материального баланса по сечению колонны.

Расчет составов пара и жидкости по высоте колонны производится по формулам, полученным из уравнений баланса и (4.59):

$$y_{ij} = [D_v (1 - E_{ij}) y_{ij-1} + E_{ij} K_{ij} x_{ij} + \gamma] / F_s; \quad (7.190)$$

$$x_{ij+1} = (V_j y_{ij} + S_F) / L_{j+1}, \quad (7.191)$$

где S_F — количество компонента, вводимого в колонну ниже j -й ступени за вычетом его отбора с фракциями; γ — количество компонента, поступающего на j -ю ступень в паровой фазе; $F_s = V_j + SV_j$; $D_v = F_s - FV_j$.

Расчет составов от куба колонны к конденсатору производится при двух концентрациях компонента в кубе, выбираемых таким образом, чтобы решение заведомо находилось между этими значениями. В качестве таковых принимаются

$${}^{(1)}x_{W_i} = 0, \quad {}^{(2)}x_{W_i} = F x_{F_i} / W; \quad (7.192)$$

$${}^{(1)}y_{W_i} = 0, \quad {}^{(2)}y_{W_i} = K W_i^{(2)} x_{W_i}. \quad (7.193)$$

В процессе определения концентраций ${}^{(1)}x_{ij}$ и ${}^{(2)}x_{ij}$ возможно получение больших по абсолютной величине значений. Для предотвращения этой ситуации надо проводить контроль на максимально допустимую величину концентрации с последующей коррекцией состава по формулам

$$x_{ij} = (1 + S) {}^{(2)}x_{ij} - S {}^{(1)}x_{ij}; \quad (7.194)$$

$$y_{ij} = (1 + S) {}^{(2)}y_{ij} - S {}^{(1)}y_{ij}, \quad (7.195)$$

где значение параметра S определяется по формулам

$$S = {}^{(2)}x_{im} / ({}^{(1)}x_{im} - {}^{(2)}x_{im}) \quad \text{для } {}^{(1)}x_{im}; \quad (7.196)$$

$$S = {}^{(2)}x_{im} - 1 / ({}^{(1)}x_{im} - {}^{(2)}x_{im}) \quad \text{для } {}^{(2)}x_{im}. \quad (7.197)$$

При известных результатах двух расчетов ${}^{(1)}x_{ij}$ и ${}^{(2)}x_{ij}$ решение находится по формулам (7.194) и (7.195), где

$$S = u_2 / (u_1 - u_2); \quad (7.198)$$

$$u_i = V_N^{(1)} y_{iN} + W {}^{(1)} x_{W_i} - \sum_i F_j x_{F_{ij}}. \quad (7.199)$$

Значения концентраций, полученные на очередной итерации, не могут быть использованы в качестве исходных для последующих расчетов, так как сумма концентраций не равно единице. Поэтому они подвергаются коррекции.

Расчет потоков пара и жидкости по высоте колонны производится путем решения уравнений теплового баланса по известному методу постоянных составов [58].

Алгоритм расчета по методу независимых концентраций состоит в следующем.

1. Задаются исходные данные (число компонентов, число тарелок, тарелка ввода питания, количество дистиллята или кубового продукта, флегмовое число, количество и состав питания, начальная температура, давление или закон изменения давления по высоте, параметры уравнений для расчета фазового равновесия в соответствии с выбранными способами описания неидеальности фаз, эффективность тарелки или тарелок, точность вычислений).

2. Рассчитываются параметры режима работы колонны (оросление, потоки пара и жидкости) и задается начальный профиль концентраций по высоте.

3. Рассчитываются константы фазового равновесия и температура кипения на каждой тарелке.

4. В цикле по каждому компоненту проводится расчет составов по формулам (7.190) и (7.191). Если текущая концентрация компонента превосходит заданную величину, то производится коррекция последней по формулам (7.194) и (7.195).

5. Рассчитываются составы пара и жидкости по формулам (7.194), (7.195), (7.198), (7.199).

6. Определяются потоки пара и жидкости по высоте колонны.

7. Вычисленные значения концентраций корректируются, проверяется условие окончания расчетов (равенство суммы концентраций единице с заданной точностью). Если условие не выполняется, то расчеты повторяются начиная с п. 3.

Подход, лежащий в основе данного метода, использован в моделирующей системе «Дистилляция» [54, 58], он показал высокую эффективность при расчете как колонн, так и комплексов. Сходимость решения существенно ухудшается при расчете режимов с зонами постоянных концентраций.

Алгоритм трехдиагональной матрицы. Система уравнений материального баланса имеет трехдиагональную структуру, если рассматривать такие многостадийные процессы, как ректификация, абсорбция, экстракция и т. д. При матричной записи такой системы в случае расчета простой колонны ненулевыми будут элементы на главной и смежной с ней диагоналях. В случае комплексов колонн появляются недиагональные элементы, соответствующие связующим потокам. Таким образом, матрица коэффициентов системы уравнений баланса содержит большое число нулевых элементов и при использовании специальных методов хранения разреженных матриц может компактно размещаться в памяти машины. Компактность хранения информации является важнейшим достоинством методов расчета, основанных на трехдиагональной структуре матрицы коэффициентов.

Рассмотрим метод расчета сложной колонны с несколькими вводами питания и отборами потоков пара и жидкости по высоте (см. рис. 7.15). Метод формулируется в проверочной постановке задачи расчета.

Математическим описанием колонны являются уравнения

терминального и теплового баланса (4.55) и (4.58), равновесное и стехиометрические соотношения (4.22) и (7.118), уравнения для конденсатора и кипятильника.

Используя соотношения (4.22) и общего материального баланса сечения колонны относительно верха

$$L_j = V_{j-1} + \sum_{l=j}^{N-1} (F_l - SL_l - SV_l) - D, \quad (7.200)$$

запишем систему (4.55) в следующем виде при допущении, что на ступени разделения достигается равновесие

$$\begin{aligned} B_1 x_{i1} + C_1 x_{i2} &= D_i; \\ \dots \dots \dots \\ A_{j-1} x_{ij-1} + B_j x_{ij} + C_j x_{ij+1} &= D_j, \quad 2 \leq j \leq N-1; \\ \dots \dots \dots \\ A_{N-1} x_{iN-1} + B_N x_{iN} &= D_N; \end{aligned} \quad (7.201)$$

или

$$\begin{array}{cccc|ccc|ccc} B_1 & C_1 & & & x_{i1} & & & D_i & & \\ A_1 & B_2 & C_2 & & x_{i2} & & & D_2 & & \\ \dots & \dots & \dots & & \dots & & & \dots & & \\ & & & A_{j-1} & B_j & C_j & & D_j & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & & \dots & & \\ & & & & & & A_{N-1} & B_N & C_N & D_{N-1} \\ & & & & & & & A_{N-1} & B_N & D_N \end{array} = \begin{array}{c} D_i \\ D_2 \\ \dots \\ D_j \\ \dots \\ D_{N-1} \\ D_N \end{array}; \quad (7.202)$$

$$A^{(i)} X^{(i)} = D^{(i)}, \quad 1 \leq i \leq k; \quad (7.203)$$

где

$$B_1 = -(W + V_1 K_{11}); \quad C_1 = L_2 = V_1 + W; \quad D_1 = 0; \quad (7.204)$$

$$A_{j-1} = V_{j-1} K_{ij-1};$$

$$\begin{aligned} B_j = -[(V_j + SV_j) K_{ij} + (L_j + SL_j)] = -[(V_j + SV_j) K_{ij} + \\ + V_{j-1} + \sum_{l=j}^{N-1} (F_l - SL_l - SV_l) - D - SL_j]; \end{aligned} \quad (7.205)$$

$$C_j = L_{j+1} = L_j + \sum_{l=j+1}^{N-1} (F_l - SL_l - SV_l) - D; \quad D_j = -F_j x_{F,j};$$

$$A_{N-1} = V_{N-1} K_{iN-1}; \quad B_N = -(L_N + D); \quad D_N = 0. \quad (7.206)$$

Система вида (7.203) записывается по каждому из компонентов разделяемой смеси, и их решение дает распределение концентраций по высоте колонны для всех компонентов.

Для расчета потоков пара и жидкости можно воспользоваться уравнениями (4.58) и (7.200), для чего из (4.58) необходимо исклю-

читать потоки жидкости заменой по балансовому соотношению,

$$(H_{j-1} - h_j)V_{j-1} + (H_j - h_j)(V_j + SV_j) - (h_j - h_{j+1})L_{j+1} + (h_{Fj} - h_j)F_j - Q_j = 0, \quad 1 \leq j \leq N. \quad (7.203)$$

Матрицы коэффициентов системы (7.203) являются трехдиагональными. Для решения таких систем можно воспользоваться специальным методом, основанном на приведении к диагональному виду с помощью элементарных преобразований по рекуррентным формулам

$$P_1 = C_1/B_1, \quad g_1 = D_1/B_1, \quad P_j = C_j/(B_j - A_j P_{j-1}), \quad 2 \leq j \leq N - 1, \quad (7.204)$$

$$g_j = (D_j - A_j g_{j-1})/(B_j - A_j P_{j-1}), \quad 2 \leq j \leq N.$$

После этого элементы вектора решения вычисляются по формулам

$$x_{iN} = q_N; \quad x_{ij} = q_j - P_j x_{i,j+1}, \quad 1 \leq j \leq N - 1. \quad (7.205)$$

Алгоритм расчета колонны состоит в следующем.

1. Задаются исходные данные для расчета (число компонентов, число тарелок, количество вводов питания, число отборов фракций по паровой и жидкой фазам, количество дистиллята, флегмовое число, точность сведения материального баланса, номера тарелки ввода питания и отбора фракций, количества и составы питания, параметры уравнений для расчета фазового равновесия, параметры для расчета энтальпии потоков).

2. Задаются начальные профили потока пара, рассчитываемые по общему материальному балансу и концентрации компонентов в жидкой фазе по высоте колонны (в качестве начального профиля концентраций можно использовать состав питания).

3. Рассчитываются константы фазового равновесия по соответствующей модели равновесия и коэффициенты матрицы системы уравнений материального баланса по уравнениям (7.204) — (7.206).

4. Рассчитываются составы по высоте колонны путем решения системы уравнений (7.209).

5. Определяются равновесные состав и температура для каждой тарелки по уравнениям (4.22) по соответствующим моделям учета неидеальности фаз.

6. Рассчитываются энтальпии потоков пара и жидкости и новые значения потока пара по уравнениям (7.207).

7. Пункты 3—6 повторяются при вновь вычисленных профилях концентрации и потоков до тех пор, пока не будет выполнено условие окончания расчетов (равенство суммы концентраций единице или температур на двух последующих итерациях по всей колонне с заданной точностью). Если условие выполняется, то после расчета потока жидкости расчет заканчивается.

Следует заметить, что в процессе расчетов сумма концентраций на тарелках (особенно на первых итерациях) в силу произвольности начального профиля может быть не равна единице. Поэтому необходимо проводить их коррекцию, в простейшем случае — нормирование. При подаче питания в перегретом состоянии предварительно нужно рассчитать составы фаз и температуру или количества фаз.

Ранее отмечалось, что одной из важнейших проблем расчета является обеспечение сходимости решения. Неустойчивость решения в значительной степени зависит от накопления ошибок округления вследствие конечности представления чисел в памяти. Особенно существенные ошибки появляются при выполнении операции вычитания сравнимых по величине чисел. Алгоритм, используемый для решения трехдиагональной системы уравнений материального баланса, не содержит операции вычитания сравнимых величин и поэтому обладает устойчивой сходимостью. Тем не менее при наличии зон постоянных концентраций возможна колебательность решения, устранить которую в большинстве случаев удается с помощью форсирующих процедур. Скорость сходимости и затраты машинного времени на решение существенно зависят от числа компонентов разделяемой смеси, числа тарелок и в меньшей степени от начального приближения. Существенным является также выбор метода определения равновесной температуры, так как эта операция выполняется на каждой итерации и для каждой тарелки.

Метод трехдиагональной матрицы оказывается малоэффективным при расчете ширококипящих и сильно неидеальных смесей. Возможно появление колебательности и даже отсутствие сходимости. Имеется целый ряд модификаций метода и, в частности, линеаризация уравнений фазового равновесия [59]. Если положить, что концентрация компонента в паровой фазе определяется количеством его жидкости, то при сохранении структуры матрицы существенно улучшается скорость сходимости решения. В этом случае коэффициенты трехдиагональной матрицы вычисляются по формулам

$$A_j = +V_j \frac{dy_{ij}}{dx_{ij}};$$

$$B_j = - \left[(V_j + SV_j) \frac{dy_{ij}}{dx_{ij}} + V_{j-1} + \right. \\ \left. + \sum_{l=j}^{N-1} (F_l - SL_l - SV_l) - D - SL_j \right]; \quad (7.210)$$

$$C_j = L_{j+1};$$

$$D_j = -V_{j-1}y_{i,j-1} + V_j y_{ij} + L_j x_{ij} - L_{j-1} x_{i,j-1} - F_j x_{F,j}.$$

При расчете ректификационных колонн с учетом эффективности тарелок в терминах КПД Мерффи матрица коэффициентов системы уравнений материального баланса имеет ненулевые элементы выше или ниже главной диагонали (в зависимости от направления нумерации тарелок), т. е. треугольную форму [60].

При учете разделительной способности j -й тарелки необходимо состав покидающего пара выразить как функцию состава жидкости на нижерасположенных тарелках колонны, т. е.

$$y_{ij} = f(x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ij}) \quad (7.213)$$

последовательной подстановкой в уравнение (2.9) значений y_{ij} , $y_{i,j-2}, \dots, y_{i1}$, выраженных через состав жидкости на данной тарелке и равновесный состав пара. Тогда для концентрации покидающего j -ю тарелку, можно записать уравнение (4.60).

С учетом (4.60) уравнение материального баланса тарелки (4.57) запишется в виде

$$V_{j-1} \sum_{l=1}^{j-1} E_{il} K_{il} x_{il} \prod_{m=l+1}^{j-1} (1 - E_{im}) - (V_j + SV_j) \sum_{l=1}^j E_{il} K_{il} x_{il} \times \\ \times \prod_{m=l+1}^j (1 - E_{im}) - (L_j + SL_j) x_{ij} + L_{j+1} x_{i,j+1} + F_j x_{Fj} = 0. \quad (7.212)$$

Таким образом, элементы матрицы коэффициентов являются функцией E_{ij} и K_{ij} , состава нижерасположенных тарелок, а система имеет вид

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} & & & & & \\ B_{21} & B_{22} & B_{23} & & & & \\ B_{31} & B_{32} & B_{33} & & & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ B_{N-1,1} & B_{N-1,2} & B_{N-1,3} & B_{N-1,4} & \dots & B_{N-1,N} & \\ B_{N1} & B_{N2} & B_{N3} & B_{N4} & \dots & B_{NN} & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \dots \\ x_{N-1} \\ x_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \dots \\ D_{N-1} \\ D_N \end{pmatrix} \quad (7.214)$$

где

$$B_{i,j+1} = L_{j+1}; \\ B_{jj} = -[(V_j + SV_j) E_{ij} K_{ij} + (L_j + SL_j)]; \\ B_{j,j-m} = [(V_j + SV_j)(1 - E_{ij}) - V_{j-1}] E_{ij-m} K_{ij-m} \prod_{l=m+1}^{j-1} (1 - E_{il}); \\ j = 1, 2, \dots, N-1, \quad m = j-1, j-2, \dots, 1; \\ D_j = -F_j x_{Fj}.$$

Система уравнений вида (7.213) записывается по каждому из компонентов разделяемой смеси, и для решения их можно воспользоваться методом, основанном на исключении недиагональных элементов матрицы, расчетные формулы которого приведены ниже:

$$g_i = D_i/B_{jj}; \\ h_j = -B_{j,j+1}/B_{jj}, \quad j = 1, 2, \dots, N-1; \\ B_{m,j+1}^* = B_{m,j+1} + B_{mj} h_j, \quad m = N, N-1, \dots, j-1; \\ D_m^* = D_m - B_{mj} g_j.$$

Звездочкой обозначены вновь вычисленные значения. Решение находится обратной подстановкой по формулам

$$x_{iN} = D_N^*/B_{NN}^*; \\ x_{ij} = g_j - h_j x_{i,j+1}. \quad (7.216)$$

По сравнению с методом трехдиагональной матрицы в данном случае требуется больший объем памяти для размещения элементов. Так, если в первом случае число ненулевых элементов равно $3N-2$, то здесь это $N^2/2 + N - 1$. Однако оказывается, что без существенной потери точности можно частью недиагональных элементов пренебречь в виду их малой величины. Действительно, как следует из (7.213), каждый последующий элемент строки левее третьего меньше предыдущего в $(1 - E_{ij})$ раз. Опыт показывает, что при $E < 0,7$, практически не снижая точности, расчеты можно производить с меньшим количеством элементов в строке (не более 15).

Кинетика массопередачи и гидродинамика потоков. Массопередача в многокомпонентных системах является одним из вопросов, которому уделяется, особенно в последнее десятилетие, огромное внимание [61—63]. И тем не менее до сих пор отсутствуют алгоритмы, позволившие бы перейти к точному расчету ректификационных колонн на основе кинетических представлений. При математическом описании межфазного массообмена движущую силу процесса принято выразить через разность концентраций, а кинетику — через коэффициент массопередачи [64].

Существующие теории массопередачи ставят своей целью дать выражения для коэффициентов массопередачи или представить их как функции частных коэффициентов массоотдачи по каждой фазе. Сюда относится двухпленочная теория Льюиса и Уитмена, в соответствии с которой предполагается, что на границе раздела фаз со стороны каждой фазы образуются ламинарные пленки, в пределах которых сосредоточено основное сопротивление массопередачу, а коэффициент массоотдачи пропорционален коэффициенту диффузии в первой степени.

В теории проницания предполагается, что кинетика массопередачи зависит от времени контакта фаз, продолжительность кон-

такта принимается постоянной. Коэффициенты массоотдачи в этом случае пропорциональны коэффициентам диффузии в степени 0,5.

По теории проникания и обновления предполагается, что поверхность контакта фаз непрерывно обновляется свежими элементами вещества. При определении коэффициентов массоотдачи учитывается скорость обновления поверхности.

В соответствии с теорией межфазной турбулентности предполагается, что на границе раздела фаз имеются интенсивные турбулентные пульсации, которые приводят к возникновению вихревого движения, сопровождающегося взаимным проникновением вихрей в обе фазы. Количественный учет межфазной турбулентности может быть произведен с помощью безразмерного фактора гидродинамического состояния двухфазной системы. На основе теории межфазной турбулентности получены выражения локальных коэффициентов массоотдачи для различных гидродинамических режимов движения потоков, отличающиеся показателем степени при коэффициенте диффузии, который изменяется от нуля в режиме развитой турбулентности до $2/3$ в ламинарном режиме. Кроме того, вводятся факторы, зависящие от гидродинамической структуры и физических характеристик фаз.

Таким образом, основное отличие известных теорий массообмена состоит в различном представлении о состоянии межфазной поверхности. Во всех случаях сохраняется зависимость коэффициентов массоотдачи от коэффициента диффузии, а для учета гидродинамических факторов и физико-химических свойств вводятся корректирующие параметры. Исходя из этого для коэффициентов массоотдачи можно записать единое выражение

$$k = A (D_m)^p, \quad (7.217)$$

где D_m — коэффициент молекулярной диффузии; A, p — параметры, значения которых зависят от гидродинамической обстановки на границе раздела фаз и свойств системы.

Для многокомпонентных систем задача описания процесса массообмена осложняется тем, что движущие силы, определяемые как разности концентраций, могут быть различными для различных компонентов, а также тем, что скорость переноса одного компонента может зависеть от движущих сил остальных компонентов смеси. Тем не менее формально для многокомпонентных систем можно использовать уравнения по аналогии с бинарными, но записанными в матричной форме:

$$q^V = [K_{ov}](Y - Y); \quad (7.218)$$

$$q^L = [K_{ox}](X - \bar{X}), \quad (7.219)$$

где q — вектор скоростей массообмена; Y, \bar{Y}, X, \bar{X} — векторы фактических и равновесных концентраций компонентов в паровой

и жидкой фаз; K_{01} , K_{02} — матрицы коэффициентов массопередачи по паровой и жидкой фазам.

В общем случае коэффициенты массоотдачи являются функцией двух групп факторов. Во-первых, они зависят от факторов, определяющих диффузионный перенос вещества к границе раздела фаз, и, во-вторых, от гидродинамического состояния межфазной поверхности. Очевидно, гидродинамические факторы будут оказывать влияние, аналогичное влиянию в бинарных системах, однако в многокомпонентных смесях диффузия имеет ряд специфических особенностей [64—66]. Правда, в работах [67, 68] обращается внимание на различие в оценке глубины проникания (толщины пленки) по теории проникания для бинарной и многокомпонентной систем. В последнем случае речь идет уже о матрице глубины проникания, физический смысл которой в общем случае (при наличии перекрестных эффектов в матрице коэффициентов диффузии) не интерпретируется. Отмечено также [68], что КПД зависит от поверхностного натяжения компонентов.

Трудности, связанные с определением коэффициентов диффузии в многокомпонентных системах, обусловили развитие методик по применению исследований бинарной массопередачи к многокомпонентной [65, 66, 69]. Предлагается рассчитывать многокомпонентный массоперенос через коэффициенты диффузии всевозможных пар компонентов смеси. Идея использования бинарных соотношений для коэффициентов диффузии при расчете массообмена в многокомпонентных смесях в ряде работ нашла практическое приложение [54], хотя еще до сих пор находится в стадии теоретической доработки.

В соответствии с общими термодинамическими представлениями о равновесии многокомпонентных систем для диффузионного потока компонента в идеальной смеси при постоянных температуре и давлении можно записать

$$q_i^V = - \sum_{j=1}^{k-1} D_{ij}^V \nabla y_j \quad (7.220)$$

Из уравнения (7.220) следует, что перенос i -го компонента определяется не только собственным градиентом концентрации, но также градиентами остальных компонентов. Коэффициенты D_{ij} можно рассматривать как коэффициенты диффузии в многокомпонентной смеси. Диагональные элементы обычно называются главными коэффициентами и соответствуют диффузии за счет собственного градиента концентраций. Эти величины всегда положительные. Недиagonальные элементы, называемые перекрестными коэффициентами диффузии, соответствуют диффузии некоторого компонента за счет градиента другого компонента. Эти величины могут быть как положительными, так и отрицательными, причем по величине превышать главные.

Коэффициенты диффузии в многокомпонентных идеальных смесях вычисляются с помощью уравнения Максвелла—Стефана

$$\nabla y_i = - \sum_{j=1}^k \frac{1}{D_{ij}} (q_i^v y_j - q_j^v y_i), \quad (7.221)$$

где D_{ij} — бинарные коэффициенты диффузии. Преобразование системы (7.221) к виду

$$\sum_{j=1}^{k-1} A_{ij} q_j^v = - \nabla y_i; \quad (7.222)$$

$$A_{ij} = \begin{cases} \sum_{p=1}^k \frac{y_p}{D_{ip}} + \frac{\rho y_i}{D_{ik}}, & l = j; \\ y_l \left(\frac{\rho}{D_{lk}} - \frac{1}{D_{lj}} \right); & \rho = \begin{cases} 1 & \text{— неэквивмолярный перенос;} \\ 0 & \text{— эквивмолярный перенос} \end{cases} \\ & l \neq j. \end{cases} \quad (7.223)$$

позволяет найти матрицу коэффициентов диффузии в многокомпонентных смесях, которая определяется как матрица, обратная к матрице системы (7.222), т. е.

$$[D] = [A]^{-1}. \quad (7.224)$$

Если в газовых смесях анализ явлений диффузии базируется на уравнениях Максвелла—Стефана, то для жидкой фазы ввиду недостаточной разработки теории растворов подобное обобщенное уравнение отсутствует. Ряд авторов предлагают использовать для описания диффузии в жидкой фазе те же уравнения, что и в газовой фазе [54, 65]. Другие считают возможным использование первого закона Фика.

В исследованиях [61, 70] показано, что перекрестные эффекты в жидких смесях проявляются в значительно более слабой степени и коэффициенты перекрестной диффузии обычно на порядок меньше главных. Поэтому при отсутствии соответствующих экспериментальных данных в качестве первого приближения для описания диффузии в жидкости может использоваться диагональная матрица, элементы которой определяются как средневзвешенные бинарные коэффициенты диффузии для всевозможных пар компонентов раствора. В работе [61] для расчета элементов матрицы коэффициентов диффузии предложено использовать те же зависимости, что и в газовой фазе, рассматривая при этом коэффициенты диффузии бинарных смесей как аддитивные функции состава смесей и коэффициентов диффузии в разбавленных растворах:

$$D_{ij} = \left(\frac{x_j}{x_i + x_j} D_{ij}^0 + \frac{x_i}{x_i + x_j} D_{ji}^0 \right) \left(1 + \frac{d \ln \gamma_i}{d \ln \gamma_j} \right). \quad (7.225)$$

Для расчета бинарных коэффициентов диффузии в газовой фазе предлагается использовать уравнение Арнольда.

В самом общем виде зависимость коэффициентов массоотдачи от коэффициентов диффузии в бинарных смесях может быть представлена в виде (7.217). Таким образом, расчет матриц коэффициентов массоотдачи формально сводится к вычислению функций от матриц, для чего можно воспользоваться формулой Сильвестра, предварительно определив собственные числа исходной матрицы коэффициентов многокомпонентной диффузии. Тогда для расчета матрицы коэффициентов массопередачи в предположении о равновесии на границе раздела фаз, линейного представления о равновесной зависимости и соблюдения аддитивности сопротивлений массопередаче предлагаются выражения вида

$$[K_{yy}]^{-1} = [K_y]^{-1} + [\mu] [K_x]^{-1}; \quad (7.226)$$

$$[K_{xx}]^{-1} = [K_x]^{-1} + [\mu]^{-1} [K_y]^{-1};$$

$$\mu_{jl} = \frac{y_l^*}{x_l} (\delta_{jl} - y_j^*) + \frac{y_k^*}{x_k} y_j^*; \quad \delta_{jl} = \begin{cases} 1, & j = l; \\ 0, & j \neq l. \end{cases}$$

При вычислении матрицы $[\mu]$ может быть учтена неидеальность фазового равновесия путем подбора соответствующих корреляций для коэффициентов активности и летучести.

Поскольку массопередача определяется полной матрицей коэффициентов массопередачи (уравнения (7.226)), то локальная эффективность на тарелках также будет определяться полной матрицей локальных эффективностей, которая при допущении полного вытеснения пара в слое барботажа может быть рассчитана по уравнению (4.64).

Состав пара, уходящего с локальной площади барботажа, определяется по уравнению

$$y_j^{(i)} = y_j^{(i-1)} + \sum_{l=1}^{k-1} E_{jl}^{(i)} (y_l^{*(i)} - y_l^{(i-1)}). \quad (7.227)$$

Из уравнения (7.227) можно получить выражение для локального КПД Мерффи через элементы матрицы локальной эффективности

$$E_{jl}^{(i)} = \sum_{l=1}^{k-1} E_{jl}^1 (y_l^{*(i)} - y_l^{(i-1)}) / (y_j^{*(i)} - y_j^{(i-1)}). \quad (7.228)$$

Из (7.228) следует, что в зависимости от движущих сил процесса массообмена величины КПД Мерффи могут изменяться в весьма широких пределах и принимать как большие положительные значения, так и отрицательные. В этом состоит принципиальное отличие явления массообмена в многокомпонентных системах с позиций КПД Мерффи. КПД Мерффи при оценке разделительной способности тарелки не может в общем случае служить характеристикой степени приближения состава пара к равновесию [71, 72].

Таким образом, расчет с использованием линеаризованной модели кинетических соотношений основан на выполнении матричных операций для приведения многокомпонентной смеси к псевдокомпонентам, для которых справедливы бинарные соотношения диффузии. При этом сохраняются все особенности многокомпонентной диффузии, так как элементы матрицы A являются функцией состава, а следовательно, и коэффициенты диффузии псевдокомпонентов также зависят от состава. С вычислительной точки зрения необходимо выполнять операции по нахождению собственных чисел и функций от матрицы для каждой тарелки и на каждой итерации, что является весьма времязатратной операцией.

Другим подходом к учету эффектов многокомпонентности при оценке эффективности разделения является решение уравнения [69].

$$dy_i/dh = -y_i \sum_{j=1}^k N_{ov,j} y_j^* + y_i^* \sum_{j=1}^n N_{ov,i} y_j \quad (7.229)$$

аналитически при условии, что величина $\sum_{j=1}^k N_{ov,i} y_j^*$ представляет собой усредненное значение числа единиц переноса по высоте Δh , отнесенное к единице высоты, и может рассматриваться как постоянная, не зависящая от переменных интегрирования. В результате решения этого уравнения выражение для определения состава пара, покидающего ячейку полного перемешивания, имеет вид

$$y_j^{(i)} = y_j^{(i-1)} \exp(-N^{(i)}) + \frac{y_j^{*(i)}}{N^{(i)}} (1 - \exp(-N^{(i)})); \quad (7.230)$$

$$y_j^{*(i)} = y_j^{*(i-1)} \left[\sum_{l=1}^k N_{ov,l} y_l^{(i-1)} / (1 - y_j^{(i-1)}) \right]; \quad N^{(i)} = \sum_{j=1}^k N_{ov,j} y_j^{*(i)}.$$

Для расчета по уравнениям (7.230) необходимо иметь число единиц переноса по каждой из пар многокомпонентной смеси. Можно воспользоваться выражениями [64]

$$N_x = 344 D_L^{0.5} (0,21 w \rho_n^{0.5} + 0,15) \tau_{ж}; \quad (7.231)$$

$$N_y = (0,776 + 4,57 h_n + 0,0238 w \rho_n^{0.5} + 0,03 L) S_c^{0.5},$$

где D_L — коэффициент диффузии, m^2/c ; w — скорость пара в рабочем сечении тарелки, m/c ; ρ_n — плотность пара, kg/m^3 ; $z_{ж}$ — длина пути жидкости на тарелке, m ; L — расход жидкости на единицу длины сливной планки, $m^3/(m \cdot c)$; D_V — коэффициент молекулярной диффузии; μ — кинематическая вязкость, m^2/c ; h_n — высота сливной перегородки, m ;

$$\tau_{ж} = z_c z_{ж} / L;$$

$$z_c = 0,042 + 0,19 h_n - 0,0135 w \rho_n^{0.5} + 0,0007 L;$$

$$S_c = \mu / D_V.$$

Практическая пригодность уравнений (7.230) показана в работах [54, 71, 72] при моделировании промышленных ректификационных колонн.

Еще более упрощающим допущением является описание каждого потока компонента независимо друг от друга. В этом случае используются корреляции для оценки коэффициентов массоотдачи, разработанные применительно к бинарной ректификации.

Уравнения (7.231) получены в результате обработки экспериментальных данных в промышленных условиях. В ряде работ [73, 74] проводились исследования для уточнения корреляций для определения коэффициентов массопередачи, а именно путем учета термических эффектов. Основным выводом является то, что при больших разностях температур кипения компонентов влияние этих эффектов весьма существенно. В рамках принятой модели кинетики массопередачи могут использоваться для оценки бинарных коэффициентов и эти уравнения.

Экспериментальное сравнение методик оценки массообмена показывает, что наиболее точным является описание по линеаризованной модели, вторая модель отражает качественную картину процесса. Что касается независимого определения переносимых потоков по бинарным соотношениям, то в определенных случаях ошибка значительная, вплоть до неверного воспроизведения характера массообмена [75]. По другим источникам [76], погрешность приближенных моделей оценивается величиной порядка 10% при конденсации смеси метанол—этанол—вода.

Рассмотрим кинетику массопередачи в процессе многокомпонентной хеморектификации, принимая следующие предположения: а) химическая реакция протекает только в жидкой фазе; б) кинетика реакций может быть сведена к линейной относительно вектора составов. Принятые предположения не снижают общности поставленной задачи, так как, во-первых, в большинстве хеморектификационных процессов реакции протекают в жидкой фазе или химическое взаимодействие в паровой фазе настолько мало, что можно пренебречь без ущерба для точности расчетов, и, во-вторых, кинетика любых реакций может быть сведена к линейной относительно вектора составов [78].

Основу математического описания массопередачи в процессах хеморектификации составляют уравнения, определяющие диффузионные потоки компонентов (7.219). Для расчета коэффициентов массоотдачи в паровой фазе можно воспользоваться, как и ранее, решением уравнений Максвелла—Стефана, а коэффициенты массоотдачи в жидкой фазе $K_x(r)$ с учетом химической реакции определяются следующим образом.

В соответствии с принятыми предположениями реакционный поток R равен $R = \nu K X$, где K — матрица констант химических реакций; ν — матрица стехиометрических коэффициентов; X — вектор концентраций компонентов смеси. Уравнение диффузии в

многокомпонентных смесях с одновременно протекающими химическими реакциями в матричной форме записывается как

$$\partial X / \partial t = D \cdot \partial^2 X / \partial z^2 + R,$$

или для стационарных условий

$$\partial^2 X / \partial z^2 = \Psi X, \quad (7.232)$$

где $\Psi = -D^{-1}K$.

Согласно пленочной теории массопередачи поток массы компонентов через границу раздела фаз определяется уравнением

$$N = -\frac{C}{\delta} D \frac{\partial X}{\partial z} \Big|_{z=0}. \quad (7.233)$$

В общем случае матрица Ψ имеет все ненулевые элементы, поэтому непосредственное решение уравнения (7.232) является сложной задачей, однако если привести ее к диагональному виду, то становится возможным получение аналитического приближения для расчета коэффициентов $K_x(r)$. Из теории матриц известно, что для любой квадратной матрицы, не имеющей кратных собственных значений, найдется невырожденная матрица T , которая приводит исходную к диагональному виду, т. е. всегда можно найти такую матрицу T , что

$$\Gamma \Lambda _ = T \Psi T^{-1}, \quad (7.234)$$

где $\Gamma \Lambda _$ — диагональная матрица. Разрешив (7.234) относительно матрицы Ψ :

$$\Psi = T^{-1} \Gamma \Lambda _ T,$$

и подставив это выражение в (7.232), получим

$$\partial^2 X / \partial z^2 = T^{-1} \Gamma \Lambda _ T X. \quad (7.235a)$$

Умножая обе части уравнения (7.235) слева на матрицу T и вводя обозначение $\hat{X} = TX$, а также учитывая, что матрица T является постоянной, получим уравнение

$$\partial^2 \hat{X} / \partial z^2 = \Gamma \Lambda _ \hat{X}, \quad (7.235b)$$

где \hat{X} — вектор концентраций псевдокомпонентов. Так как предполагается, что перенос вещества осуществляется за счет одной диффузии, то (7.235b) можно рассматривать как систему связанных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, решением которого является

$$\hat{X} = C_1 \exp(\Gamma \Lambda _ z) + C_2 \exp(-\Gamma \Lambda _ z),$$

где C_1 и C_2 — векторы констант интегрирования, которые определяются исходя из условий на границах диффузионной пленки

$z = 0$; $\hat{X} = \hat{X}^i$; $z = \delta$; $\hat{X} = \hat{X}^0$. Вектор концентраций псевдокомпонентов \hat{X} определяется по найденным значениям C_1 и C_2 . Профиль концентраций действительных компонентов X внутри диффузионной пленки рассчитывается по найденному значению \hat{X} с помощью преобразования $X = T^{-1} \hat{X}$, в результате чего получим

$$X = \{X^i \exp(-\Gamma \Lambda _ z) - X^0\} \{\exp(\Gamma \Lambda _ z) - \exp(-\Gamma \Lambda _ z)\} A^{-1}, \quad (7.236)$$

где $A = \exp(-\Gamma \Lambda _ \delta) - \exp(\Gamma \Lambda _ \delta)$. Значение частной производной, входящей в уравнение (7.233), получается дифференцированием (7.236) по границе раздела фаз:

$$\frac{\partial X}{\partial z} \Big|_{z=0} = \Gamma \Lambda _ \text{sh}(\Gamma \Lambda _ \delta) \{X^0 - \sigma X^i\}, \quad (7.237)$$

где

$$\text{sh}(\Gamma \Lambda _ \delta) = \frac{1}{2} \{\exp(\Gamma \Lambda _ \delta) - \exp(-\Gamma \Lambda _ \delta)\};$$

$$\sigma = \exp(-\Gamma \Lambda _ \delta).$$

Определив экспериментально или рассчитав теоретически матрицу коэффициентов диффузии в жидкой фазе D , из соотношений (7.235a) и (7.237) получим уравнение, определяющее поток массы компонентов через границу раздела фаз:

$$N = CD^{-1} \text{sh}(\Gamma \Lambda _ \delta) \Gamma \Lambda _ (\sigma X^i - X^0) / \delta. \quad (7.238)$$

Формула для расчета коэффициентов $K_x(r)$ получается в результате сравнения уравнений (7.238) и (7.219), откуда следует, что

$$K_x(r) = CD^{-1} \text{sh}(\Gamma \Lambda _ \delta) \Gamma \Lambda _ / \delta. \quad (7.239)$$

Таким образом, коэффициенты массоотдачи в жидкой фазе в процессе многокомпонентной хеморектификации зависят не только от диффузионных свойств и концентраций компонентов, но и от кинетических параметров реакций, функцией которых являются элементы матрицы $\Gamma \Lambda _$. Кроме того, из уравнения (7.238) следует, что реакции оказывают влияние не только на коэффициенты массоотдачи, но и на движущие силы процесса, причем оценка степени этого влияния определяется величиной σ . Рассчитав по формуле (7.239) коэффициенты $K_x(r)$ и воспользовавшись соотношениями (7.226), можно найти общие коэффициенты массопередачи $K_{\Sigma}(r)$.

Результаты экспериментальных исследований, проведенные на примере реакции

Уксусная кислота (1) + Этанол (2) \rightleftharpoons Вода (3) + Этилацетат (4), показали адекватность рассмотренного выше математиче-

ского описания кинетики массопереноса в процессах хеморектификации. В табл. 7.7 приведено сравнение расчетных и экспериментальных составов пара, покидающего тарелку.

Таблица 7.7

Температура, °C	Состав пара, покидающего тарелку, мольн. доля							α
	ν_1^p	ν_2^p	ν_3^p	ρ_4	ν_1^z	ν_2^z	ν_3^z	
73	0,00	0,42	0,07	0,51	0,00	0,48	0,05	0,47
80	0,03	0,64	0,07	0,26	0,01	0,69	0,03	0,22
82	0,03	0,62	0,18	0,17	0,04	0,67	0,16	0,13
92	0,16	0,47	0,25	0,11	0,19	0,49	0,20	0,12

При расчете разделительной способности тарелки в целом необходимо учитывать структуру движения жидкости на тарелке, а также характер распределения пара по площади барботажа. Рассмотренные методики позволяют вычислять локальные характеристики массопереноса, которые могут быть распространены на весь массообменный объем путем принятия соответствующей модели структуры потоков. Такой подход позволяет рассчитывать разделительную способность тарелок со сложными гидродинамическими структурами, включая байпасирование, каналообразование, застойные зоны и т. д. Локальные же характеристики определяются составами пара и жидкости в данной точке, физико-химическими свойствами разделяемой смеси и гидродинамической обстановкой в элементарном объеме.

В силу стохастического характера явлений массопереноса достижение равновесного состояния подчинено вероятностным законам распределения энергии и массы в пространстве и во времени. Если принять во внимание, что время контакта фаз пропорционально межфазной поверхности, то можно сделать вывод о том, что степень достижения равновесия на ступени разделения определяется гидродинамической обстановкой и в конечном счете должна учитываться при определении эффективности.

В предположении, что известны функции парораспределения и параметры распределения жидкости для комбинированных моделей, равновесные зависимости в пределах массообменного пространства аппроксимируются линейными соотношениями, а пар в межтарельчатом пространстве идеально перемешан, были получены выражения для матриц коэффициентов эффективности применительно к различным гидродинамическим моделям [77] (см. табл. 4.6). Для модели идеального перемешивания матрица коэффициентов эффективности совпадает с матрицей локальных эффективностей и определяется выражением (4.64).

Таким образом, при известной гидродинамике потоков задача расчета разделительной способности тарелки состоит из расчета локальной эффективности массообменного элемента, матрицы коэффициентов эффективности для соответствующей модели структуры потоков, усредненного состава пара, уходящего с тарелки.

7.3.3. Алгоритмы расчета совмещенных процессов

Моделирование и оптимизация технологического производства в целом, а также наличие достоверных моделей отдельных процессов позволяют ставить задачу совмещения отдельных стадий в одном или группе аппаратов, рассматривая общее математическое описание. Основной целью такого рассмотрения является оценка эффективности по некоторому критерию (например, по энергозатратам) и определение условий непротиворечивости такого совмещения. Эффективность совмещенных процессов следует рассматривать в двух аспектах. Во-первых, снижение капитальных затрат за счет уменьшения числа единиц оборудования и, во-вторых, снижение эксплуатационных расходов за счет снижения и энергетического объединения материальных потоков. Негативная сторона такого совмещения заключается в более жестких условиях эксплуатации и соответственно более четком ведении процесса.

Переход к исследованию совмещенных процессов является следствием развития метода математического моделирования, способствовавшего пониманию сложных явлений. Совместное протекание нескольких процессов, например ректификации и химической реакции, абсорбции с химической реакцией не является чем-то исключительным в промышленных условиях и обычно известно. Но, как правило, один из них превалирует по скорости, интенсивности и прочим показателям над другим, как бы протекая на фоне другого. Если нежелательное влияние побочного процесса становится существенным, то принимаются меры по его подавлению, например, путем снижения температуры или добавлением стабилизаторов в случае химических реакций.

Под совмещенными процессами понимают такие, когда два или более процессов протекают одновременно с эффективностью на уровне или выше, чем раздельно. В этом случае нет необходимости подавлять какой-либо из них, а наоборот, предпринимаются усилия в поиске условий их положительного взаимовлияния.

Ниже рассмотрены математические модели двух типов совмещенных процессов: ректификации с экстракцией (азеотропно-экстрактивная ректификация) и ректификации с химической реакцией.

Азеотропно-экстрактивная ректификация как метод разделения близкокипящих и азеотропных смесей известен давно и широко

ского описания кинетики массопереноса в процессах хеморектификации. В табл. 7.7 приведено сравнение расчетных и экспериментальных составов пара, покидающего тарелку.

Таблица 7.7

Температура, °C	Состав пара, покидающего тарелку, мольн. доля							
	ν_1^p	ν_2^p	ν_3^p	ν_4^p	ν_1^a	ν_2^a	ν_3^a	ν_4^a
73	0,00	0,42	0,07	0,51	0,00	0,48	0,05	0,47
80	0,03	0,64	0,07	0,26	0,01	0,69	0,03	0,22
82	0,03	0,62	0,18	0,17	0,04	0,67	0,16	0,13
92	0,16	0,47	0,25	0,11	0,19	0,49	0,20	0,12

При расчете разделительной способности тарелки в целом необходимо учитывать структуру движения жидкости на тарелке, а также характер распределения пара по площади барботажа. Рассмотренные методики позволяют вычислять локальные характеристики массопереноса, которые могут быть распространены на весь массообменный объем путем принятия соответствующей модели структуры потоков. Такой подход позволяет рассчитывать разделительную способность тарелок со сложными гидродинамическими структурами, включая байпасирование, каналообразование, застойные зоны и т. д. Локальные же характеристики определяются составами пара и жидкости в данной точке, физико-химическими свойствами разделяемой смеси и гидродинамической обстановкой в элементарном объеме.

В силу стохастического характера явлений массопереноса достижение равновесного состояния подчинено вероятностным законам распределения энергии и массы в пространстве и во времени. Если принять во внимание, что время контакта фаз пропорционально межфазной поверхности, то можно сделать вывод о том, что степень достижения равновесия на ступени разделения определяется гидродинамической обстановкой и в конечном счете должна учитываться при определении эффективности.

В предположении, что известны функции парораспределения и параметры распределения жидкости для комбинированных моделей, равновесные зависимости в пределах массообменного пространства аппроксимируются линейными соотношениями, а пар в межтарельчатом пространстве идеально перемешан, были получены выражения для матриц коэффициентов эффективности применительно к различным гидродинамическим моделям [77] (табл. 4.6). Для модели идеального перемешивания матрица коэффициентов эффективности совпадает с матрицей локальных эффективностей и определяется выражением (4.64).

Таким образом, при известной гидродинамике потоков задача расчета разделительной способности тарелки состоит из расчета локальной эффективности массообменного элемента, матрицы коэффициентов эффективности для соответствующей модели структуры потоков, усредненного состава пара, уходящего с тарелки.

7.3.3. Алгоритмы расчета совмещенных процессов

Моделирование и оптимизация технологического производства в целом, а также наличие достоверных моделей отдельных процессов позволяют ставить задачу совмещения отдельных стадий в одном или группе аппаратов, рассматривая общее математическое описание. Основной целью такого рассмотрения является оценка эффективности по некоторому критерию (например, по энергозатратам) и определение условий непротиворечивости такого совмещения. Эффективность совмещенных процессов следует рассматривать в двух аспектах. Во-первых, снижение капитальных затрат за счет уменьшения числа единиц оборудования и, во-вторых, снижение эксплуатационных расходов за счет снижения и энергетического объединения материальных потоков. Главная сторона такого совмещения заключается в более жестких условиях эксплуатации и соответственно более четком ведении процесса.

Переход к исследованию совмещенных процессов является следствием развития метода математического моделирования, способствовавшего пониманию сложных явлений. Совместное протекание нескольких процессов, например ректификации и химической реакции, абсорбции с химической реакцией не является чем-то исключительным в промышленных условиях и обычно известно. Но, как правило, один из них превалирует по скорости, интенсивности и прочим показателям над другим, как бы протекая на фоне другого. Если нежелательное влияние побочного процесса становится существенным, то принимаются меры по его подавлению, например, путем снижения температуры или добавлением стабилизаторов в случае химических реакций.

Под совмещенными процессами понимают такие, когда два или более процессов протекают одновременно с эффективностью на уровне или выше, чем раздельно. В этом случае нет необходимости подавлять какой-либо из них, а наоборот, предпринимаются усилия в поиске условий их положительного взаимовлияния.

Ниже рассмотрены математические модели двух типов совмещенных процессов: ректификации с экстракцией (азеотропно-экстрактивная ректификация) и ректификация с химической реакцией.

Азеотропно-экстрактивная ректификация как метод разделения близкипящих и азеотропных смесей известен давно и широко

ко применяется в промышленности. Однако расчеты показывают, что ему свойственны и такие положительные качества, как возможность снижения энергетических затрат за счет перераспределения потоков внутри колонны и применения специальных контактных устройств для обеспечения расслаивания жидкой фазы по высоте колонны. Правда, при искусственном создании расслаивающихся смесей применение метода сопряжено с подбором разделяющего агента и последующей его регенерацией.

Целенаправленное сочетание ректификации и химической реакции возможно в тех случаях, когда реакция протекает с высокой скоростью и большим тепловым эффектом и их совместное протекание непротиворечиво. Основная цель совмещения состоит в активном использовании тепла химической реакции непосредственно в одном аппарате без промежуточных преобразований и, следовательно, с высокой эффективностью. В отличие от обычно применяемой рекуперации тепла реакции в случае совмещения должна уменьшиться инерционность объекта и, следовательно, возрасти область устойчивых режимов работы.

Алгоритм расчета азеотропно-экстрактивной ректификации. Азеотропно-экстрактивная ректификация является широко распространенным методом разделения, что обусловлено, в свою очередь, распространенностью азеотропных систем, а также возможностью более легкого разделения смеси по сравнению с обычной ректификацией. Этот метод выделения целевых продуктов таит в себе большие возможности по организации более экономичных систем, поскольку наряду с ректификацией смеси имеется возможность использования естественного свойства расслаивания без каких-либо затрат энергии.

Современное состояние проблемы выбора разделяющего агента и расчета равновесия многофазных систем позволяет перейти от экспериментальных методов разработки таких процессов к расчетным. И основу таких расчетов составляют алгоритмы воспроизведения условий расслаивания сильно неидеальных смесей по высоте колонны, в декантаторах, которые являются обязательными элементами азеотропно-экстрактивной ректификации. Алгоритмы, позволяющие рассчитывать равновесие в системах жидкость—жидкость—пар и декантаторы различного типа приведены в разд. 7.1.

Математическое описание многокомпонентной экстрактивной и азеотропной ректификации более сложное по сравнению с двухфазной ректификацией. Этим объясняется, в основном, экспериментальный подход к исследованию таких установок в практике работы проектных организаций. Неучет же особенностей азеотропно-экстрактивной ректификации на стадии проектирования приводит к принятию на стадии проектирования заведомо неоптимальных технологических решений.

К особенностям процесса, которые могут усложнить процес-

счета, можно отнести значительное изменение расходов пара и жидкости по высоте аппарата вследствие различных теплот испарения и большой теплоты смешения компонентов, высокие концентрации разделяющих агентов (70—90%), значительное отличие температур кипения разделяющих агентов и компонентов смеси, более существенную зависимость эффективности процесса от температуры и давления в связи с тем, что разделяющий агент может частично смешиваться с остальными компонентами, возможность расслаивания жидкой фазы на тарелках колонны. Помимо этого, алгоритмы решения равновесных и балансовых соотношений значительно сложнее.

Принципиальная возможность расчета и перспективность использования азеотропно-экстрактивной ректификации была показана в работе [48], где предложена и схема алгоритма, основанная на методике релаксации. Однако основная задача состоит в разработке эффективной процедуры решения системы уравнений материального баланса, поскольку, обладая устойчивой сходимостью, метод релаксации весьма времеемок. Позднее был предложен комбинированный метод, основанный на методах релаксации и трехдиагональной матрицы [79]. Другим подходом является использование метода Ньютона—Рафсона для решения системы уравнений материального баланса [80]. И все же в виду сложности задачи основное внимание до сих пор уделяется разработке алгоритмов сведения материального баланса при отборе одной из фаз со ступени разделения или расслаивании целевых продуктов в гравитационных декантаторах. Но этим не исчерпываются особенности ректификации с расслаиванием жидких фаз. Большие возможности этого процесса заключаются в перераспределении потоков отдельных фаз внутри колонны на специальных устройствах [81] для создания необходимого температурного режима, а также изменения условий протекания процесса.

В связи с указанными причинами сформулируем и решим задачу разработки алгоритма расчета азеотропно-экстрактивной ректификации в общем виде. При этом в задаче учитывается возможность расслаивания жидкой фазы по высоте колонны, допустимая организация рециклов по любой из фаз как внутри отдельной колонны, так и в комплексе взаимосвязанных колонн с промежуточными и конечными декантаторами (рис. 7.19), расчет может вестись как при допущении равновесия между фазами, на тарелках, так и с учетом кинетики массопередачи, алгоритмы расчета обычной ректификации и экстракции являются частными случаями предлагаемого алгоритма [81].

Алгоритм основан на решении системы уравнений материального баланса с блочной матрицей коэффициентов методом Ньютона—Рафсона при аналитическом определении частных производных.

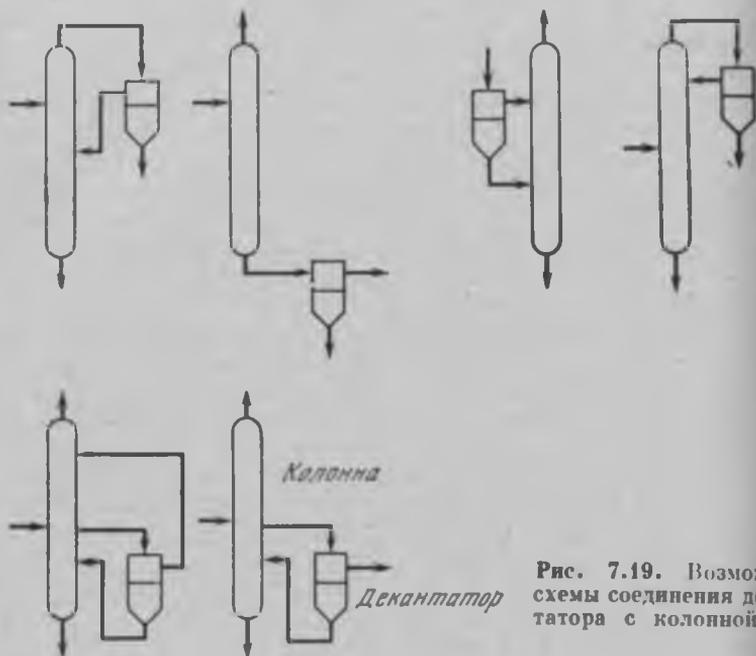


Рис. 7.19. Возможные схемы соединения декантатора с колонной

Математическое описание колонны включает, как и ранее рассмотренные модели, уравнения балансов, фазового равновесия и стехиометрические соотношения, записанные с учетом наличия двух жидких фаз, парового и рециркулируемых потоков (рис. 7.19): уравнение общего материального баланса тарелки

$$V_{j-1} + L_{j+1}^{(1)} + L_{j+1}^{(2)} + F_j + R_j - V_j - SV_j - L_j = 0, \quad 1 \leq j \leq N; \quad (7.240)$$

уравнение покомпонентного материального баланса тарелки

$$V_{j-1}y_{ij-1} + L_{j+1}^{(1)}x_{ij+1}^{(1)} + L_{j+1}^{(2)}x_{ij+1}^{(2)} + F_jx_{Fi} + R_jx_{iR} - (V_j + SV_j)y_{ij} - L_jx_{ij} = 0, \quad 1 \leq j \leq N; \quad (7.241)$$

уравнение теплового баланса тарелки

$$V_{j-1}h_{j-1} + L_{j+1}^{(1)}h_{j+1}^{(1)} + L_{j+1}^{(2)}h_{j+1}^{(2)} + F_jh_{Fj} + R_jh_R - (V_j + SV_j)H_j - L_jh_j = 0, \quad 1 \leq j \leq N; \quad (7.242)$$

уравнение фазового равновесия (7.116) — (7.118) и соотношение для расчета состава покидающего тарелку пара (4.60).

Расслаивание жидкой фазы учитывается с помощью фактора расслаивания η , равного мольной доле одной из жидких фаз в смеси. При $\eta = 1$ или 0 на тарелке присутствует только одна фаза. Потоки жидких фаз $L_j^{(1)}$ и $L_j^{(2)}$ связаны с общим потоком

жидкости, стекающей с j -й тарелки, и боковыми отборами следующими соотношениями:

$$L_j = L_j^{(1)} + L_j^{(2)} + SL_j^{(1)} + SL_j^{(2)}; \quad (7.243)$$

$$L_j^{(1)} + SL_j^{(1)} = \eta_j L_j, \quad (7.244)$$

брутто-состав стекающей с j -й тарелки равен

$$X_{ij} = [(L_j^{(1)} + SL_j^{(1)}) x_{ij}^{(1)} + (L_j^{(2)} + SL_j^{(2)}) x_{ij}^{(2)}] / L_j. \quad (7.245)$$

Составы жидких фаз связаны выражением (7.119)

$$x_{ij} = \eta_j x_{ij}^{(1)} + (1 - \eta_j) x_{ij}^{(2)}.$$

При наличии боковых отборов в колонне необходимо задать величину потока и его состав. При отборе парового потока состав будет одинаковым с составом пара над тарелкой. При отборе же жидкости состав будет зависеть от того, какая из фаз отбирается. Если отбирается жидкость брутто-состава, то, очевидно, и состав будет равен брутто-составу жидкости. Однако чаще всего отбирается одна из фаз. Тогда состав будет совпадать с составом соответствующей фазы, а величина потока будет равна количеству этой фазы, т. е.

$$SL_j^{(1)} = \eta_j SL_j; \quad (7.246)$$

$$SL_j^{(2)} = (1 - \eta_j) SL_j. \quad (7.247)$$

Энтальпии потоков для уравнения теплового баланса могут быть определены обычным способом, а для брутто-составов — с использованием фактора расслаивания η , т. е.

$$h^{(i)} = \sum_j x_j^{(i)} h_j^{(i)}; \quad (7.248)$$

$$h = \eta h^{(1)} + (1 - \eta) h^{(2)}. \quad (7.249)$$

Таким образом, математическое описание азеотронной и экстрактивной ректификаций с расслаиванием по жидкой фазе включает $N(3k+4)$ уравнений (7.241), (7.242), (7.116) — (7.118) и $N(3k+4)$ неизвестных переменных: $3Nk$ мольных долей компонентов в паре и жидких фазах, $3N$ значений потоков пара и жидкости, а также N значений температуры по высоте колонны. Система уравнений математического описания является нелинейной и для ее решения воспользуемся методом Ньютона—Рафсона. С этой целью запишем уравнения (7.241) в виде

$$r_{ij} = V_{j-1} y_{i,j-1} + L_{j-1}^{(1)} x_{i,j+1}^{(1)} + L_{j-1}^{(2)} x_{i,j+1}^{(2)} + F_j x_{Fij} + R_j x_{Rij} - (V_j + SV_j) y_{ij} - L_j x_{ij} = 0 \quad (7.250)$$

и разложим функции невязок по x в ряд Тейлора до члена первого порядка включительно:

$$r_{ij} = r_{ij}^{(n)} + \sum_{l=j-1}^{j+1} \sum_m^k \frac{\partial r_{ij}}{\partial x_{ml}} \Delta x_{ml} + \sum_{l=1}^k \frac{\partial r_{ij}}{\partial x_{Rlj}} \Delta x_{Rlj} = 0. \quad (7.251)$$

В выражении (7.251) первая сумма соответствует производным по $x_{l,j-1}$, x_{lj} и $x_{l,j+1}$, а вторая — по составу рециклического потока.

Поскольку величины приращений Δx_{ij} связаны соотношениями

$$\Delta x_{kj} = - \sum_i^{k-1} \Delta x_{ij},$$

то уравнение (7.251) можно переписать в виде

$$\begin{aligned} r_{ij}^{(n+1)} = r_{ij}^{(n)} + \sum_{m=j-1}^{j+1} \sum_l^{k-1} \left(\frac{\partial r_{ij}}{\partial x_{lm}} - \frac{\partial r_{ij}}{\partial x_{km}} \right) \Delta x_{lm} + \\ + \sum_{l=1}^{k-1} \left(\frac{\partial r_{ij}}{\partial x_{Ril}} - \frac{\partial r_{ij}}{\partial x_{Rli}} \right) \Delta x_{Ril} = 0. \end{aligned} \quad (7.252)$$

Тогда после подстановки в (7.252) выражений (7.250) получим

$$\begin{aligned} r_{ij}^{(n+1)} = r_{ij}^{(n)} + V_{j-1} \sum_{l=1}^{k-1} \left(\frac{\partial y_{l,j-1}}{\partial x_{l,j-1}} - \frac{\partial y_{l,j-1}}{\partial x_{k,j-1}} \right) \Delta x_{l,j-1} + \\ + \left[L_{j+1}^{(1)} \sum_{l=1}^{k-1} \left(\frac{\partial x_{l,j+1}^{(1)}}{\partial x_{l,j+1}} - \frac{\partial x_{k,j+1}^{(1)}}{\partial x_{k,j+1}} \right) + \right. \\ \left. + L_{j+1}^{(2)} \sum_{l=1}^{k-1} \left(\frac{\partial x_{l,j+1}^{(2)}}{\partial x_{l,j+1}} - \frac{\partial x_{k,j+1}^{(2)}}{\partial x_{k,j+1}} \right) \right] \Delta x_{l,j+1} - \\ - (V_j + SV_j) \sum_{l=1}^{k-1} \left(\frac{\partial y_{ij}}{\partial x_{ij}} - \frac{\partial y_{ij}}{\partial x_{kj}} \right) \Delta x_{ij} + \\ + R_j \sum_{l=1}^{k-1} \left(\frac{\partial x_{ij}}{\partial x_{Rl}} - \frac{\partial x_{ij}}{\partial x_{Rk}} \right) \Delta x_{Rl} - L_j \Delta x_{ij} = 0, \end{aligned} \quad (7.253)$$

или в матричной форме

$$[R][\Delta X] = -[r], \quad (7.254)$$

где $[\Delta X]$, $[r]$ — векторы приращений концентраций и невязок

$$[\Delta X]_j = \begin{pmatrix} \Delta x_{1j} \\ \Delta x_{2j} \\ \vdots \\ \Delta x_{k-1j} \end{pmatrix}; \quad [r] = \begin{pmatrix} r_{1j} \\ r_{2j} \\ \vdots \\ r_{k-1j} \end{pmatrix}; \quad (7.255)$$

Матрица частных производных (якобиан) вида

$$|R| = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & & & & a_{pm} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ & a_{j, j-1} & a_{j, j} & a_{j, j+1} & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\ a_{ql} & & a_{N, N-1} & & a_{NN} & \end{pmatrix}. \quad (7.256)$$

Матрица R имеет структуру, близкую к трехдиагональной. Ненулевые элементы появляются при наличии рециклов по фазам. В свою очередь каждый элемент представляет собой квадратную подматрицу порядка $(k-1) \times (k-1)$:

$$a_{ij} = \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & \dots & d_{1l} & \dots & d_{1k-1} \\ d_{21} & d_{22} & \dots & d_{2l} & \dots & d_{2k-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ d_{k-11} & d_{k-12} & \dots & d_{k-1l} & \dots & d_{k-1k-1} \end{pmatrix}; \quad (7.257)$$

$$d_{ml} = \partial r_{mi} / \partial x_{lj} - \partial r_{mi} / \partial x_{kj}.$$

Для оценки частных производных $\partial x_i^{(1)} / \partial x_{lj}$, $\partial x_i^{(2)} / \partial x_{lj}$, $\partial y_{ij} / \partial x_{lj}$ в выражении (7.253) воспользуемся уравнениями фазового равновесия (7.116), (7.117) и материального баланса (7.120), (7.122), которые запишутся в виде

$$F_{1i} = y_i - P_i^0 x_i^{(1)} \gamma_i(x_j^{(1)}, T) / P = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k; \quad (7.258)$$

$$F_{2i} = \Phi_i^{(1)} - \Phi_i^{(2)} = x_i^{(1)} \gamma_i^{(1)}(X_j^{(1)}, T) - x_i^{(2)} \gamma_i^{(2)}(X_j^{(2)}, T) = 0, \\ i = 1, 2, \dots, k; \quad (7.259)$$

$$F_{3i} = x_i - \eta x_i^{(1)} - (1 - \eta) x_i^{(2)} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k; \quad (7.260)$$

$$F_{4i} = \sum_j \{x_j (1 - k_j) / [\eta(k_j - 1) + 1]\} = 0. \quad (7.261)$$

Дифференцируя неявную функцию (7.259) по x_j , получим

$$\frac{\partial F_{2i}}{\partial x_j} = \sum_{l=1}^k \left(\frac{\partial F_{2i}}{\partial x_l^{(1)}} \frac{\partial x_l^{(1)}}{\partial x_j} \right) - \sum_{l=1}^k \left(\frac{\partial F_{2i}}{\partial x_l^{(2)}} \frac{\partial x_l^{(2)}}{\partial x_j} \right) = 0, \quad (7.262)$$

или в матричной форме

$$A^{(1)}DX^{(1)} - A^{(2)}DX^{(2)} = 0, \quad (7.263)$$

где $A^{(s)}$ — матрица частных производных активности компонентов в i -й фазе (7.126), производные от которых по составу фаз получены ранее (уравнения (7.133)).

Для вычисления частных производных $\partial x_i^{(1)} / \partial x_j$ и $\partial x_i^{(2)} / \partial x_j$

продифференцируем функцию F_{3i} по x_j :

$$\sum_m^k \frac{\partial F_{3i}}{\partial x_m^{(1)}} \frac{\partial x_m^{(1)}}{\partial x_j} + \sum_m^k \frac{\partial F_{3i}}{\partial x_m^{(2)}} \frac{\partial x_m^{(2)}}{\partial x_j} + \frac{\partial F_{3i}}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x_j} + \frac{\partial F_{3i}}{\partial x_j} = 0, \quad (7.264)$$

или после подстановки значений производных $\partial F_{3i}/\partial x_m^{(1)}$, $\partial F_{3i}/\partial x_m^{(2)}$, $\partial F_{3i}/\partial \eta$, $\partial F_{3i}/\partial x_j$

$$-\eta \frac{\partial x_i^{(1)}}{\partial x_j} + (\eta - 1) \frac{\partial x_i^{(2)}}{\partial x_j} + (x_i^{(2)} - x_i^{(1)}) \frac{\partial \eta}{\partial x_j} + \delta_{ij} = 0. \quad (7.265)$$

Тогда

$$\frac{\partial x_i^{(1)}}{\partial x_j} = \frac{\eta - 1}{\eta} \frac{\partial x_i^{(2)}}{\partial x_j} + \frac{(x_i^{(2)} - x_i^{(1)})}{\eta} \frac{\partial \eta}{\partial x_j} + \frac{\delta_{ij}}{\eta}. \quad (7.266)$$

Выражение для $\partial \eta / \partial x_j$ можно получить дифференцированием F_{4i} по x_j :

$$\partial \eta / \partial x_j = [x_j^{(1)}(k_j - 1)] / \{x_j \sum_i [(x_i^{(1)})^2 / x_i]\}; \quad (7.267)$$

окончательно

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^k \left[\frac{\partial a_i^{(2)}}{\partial x_i^{(2)}} - \frac{\eta - 1}{\eta} \frac{\partial a_i^{(1)}}{\partial x_j} \right] \frac{\partial x_i^{(2)}}{\partial x_j} = \\ = \sum_{i=1}^k \frac{\partial a_i^{(1)}}{\partial x_i^{(1)}} \left[\frac{(x_i^{(2)} - x_i^{(1)})}{\eta} \frac{\partial \eta}{\partial x_j} + \frac{\delta_{ij}}{\eta} \right], \end{aligned} \quad (7.268)$$

или в матричной форме

$$\left[A^{(2)} - \frac{\eta - 1}{\eta} A^{(1)} \right] DX^{(2)} = \frac{1}{\eta} A^{(1)} [(X^{(2)} - X^{(1)})P + E]. \quad (7.269)$$

Здесь $A_{ii}^{(2)} = \partial a_i^{(2)} / \partial x_i^{(2)}$; $A_{ii}^{(1)} = \partial a_i^{(1)} / \partial x_i^{(1)}$; $DX_j^{(2)} = \partial x_i^{(2)} / \partial x_j$; $P_j = \partial \eta / \partial x_j$.

Из уравнения (7.269) легко определяется матрица частных производных

$$DX^{(2)} = \left[A^{(2)} - \frac{\eta - 1}{\eta} A^{(1)} \right]^{-1} \frac{1}{\eta} A^{(1)} [(X^{(2)} - X^{(1)})P + E], \quad (7.270)$$

а выражение для матрицы $DX^{(1)}$ — из уравнения (7.260):

$$DX^{(1)} = (A^{(1)})^{-1} A^{(2)} DX^{(2)}. \quad (7.271)$$

Для вычисления производной $\partial y_i / \partial x_j$ воспользуемся выражением (7.258)

$$\frac{\partial y_i}{\partial x_j} = \sum_{l=1}^k \frac{\partial y_i}{\partial x_l^{(1)}} \frac{\partial x_l^{(1)}}{\partial x_j} + \sum_{l=1}^k \frac{\partial y_i}{\partial T} \frac{\partial T}{\partial x_l^{(1)}} \frac{\partial x_l^{(1)}}{\partial x_j}, \quad (7.272)$$

или в матричной форме записи

$$DY = [DY^{(1)} + DYT \cdot DT] DX^{(1)}, \quad (7.273)$$

где

$$\frac{\partial y_i}{\partial x_l^{(1)}} = \frac{P_i^0}{P} \frac{\partial a_l^{(1)}}{\partial x_l^{(1)}}; \quad (7.274)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial y_i}{\partial T} = & \frac{x_i^{(1)}}{P} \left[P_i^0 \left(\frac{A_{2i}}{T^2} + A_{3i} + \frac{A_{4i}}{T} \right) \gamma_i(x_i^{(1)}, T) + \right. \\ & \left. + P_i^0 (\gamma_i(X_i^{(1)}, T))_T \right]^2. \end{aligned} \quad (7.275)$$

Для уравнения НРТЛ производная $\partial \gamma_i / \partial T$ равна

$$\begin{aligned} \frac{\partial \gamma_i}{\partial T} = & \gamma_i \left[(z_i)_T + \sum_{m=1}^k \left(\frac{x_m G_{lm} \alpha_{lm} \tau_{lm} V_m}{T} + \frac{x_m G_{lm} \sum_l x_l^{(1)} G_{ll} \alpha_{ll} \tau_{ll}}{T} \right) \times \right. \\ & \left. \times V_m^2 (\tau_{lm} - z_m) + \sum_{m=1}^k \frac{x_m G_{lm}}{V_m} \left(-\frac{\tau_{lm}}{T} - (z_m)_T \right) \right]; \end{aligned} \quad (7.276)$$

$$(z_i)_T = [(W_i)_T V_i - W_i (V_i)_T] / V_i^2;$$

$$(W_i)_T = \sum_{m=1}^k x_m^{(1)} [(G_{ml})_T \tau_{ml} + G_{ml} (\tau_{ml})_T],$$

$$(V_i)_T = \sum_{m=1}^k x_m^{(1)} (G_{ml})_T;$$

$$(G_{lm})_T = G_{lm} \alpha_{lm} \tau_{lm} / T.$$

Линеаризованная система уравнений материального баланса (7.254) имеет блочную квазидиагональную матрицу коэффициентов, имеющую при наличии рециклов ненулевые недиагональные элементы. Для ее решения воспользуемся методом исключения Гаусса, заключающемся в следующем.

Пусть ненулевой элемент расположен выше трех диагоналей.

В случае, если ненулевой элемент находится ниже трех главных диагоналей, инверсией матрицу можно привести к виду (7.278). Элементы матрицы после инверсии будут определяться выражениями

$$\begin{aligned} F_j^* &= F_{N-j+1}; & B_j^* &= B_{N-j+1}; & C_j^* &= C_{N-j+1}; \\ A_j^* &= A_{N-j+1}; & C_{N-q+1, N-l+1}^* &= A_{ql}, \end{aligned} \quad (7.279)$$

где F^* , B^* , C^* , A^* , C_{ij}^* — элементы матрицы после инверсии индексов. После решения системы уравнений с вновь сформулированной матрицей и вектором свободных членов необходимо провести обратную перестановку в векторе решения q :

$$q_j^* = q_{N-j+1}, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (7.280)$$

Алгоритм расчета колонны состоит в следующем.

1. Задаются начальные приближения по составам (включая суб колонны) и температуре, составы и количества питаний, величины отборов.

2. Рассчитываются составы равновесных жидких фаз $x_{ij}^{(1)}$ и $x_{ij}^{(2)}$ по алгоритму, изложенному в разд. 7.3.1, и мольная доля одной из жидких фаз (уравнение (7.120)).

3. Определяется состав паровой фазы y_{ij} (уравнения (7.118), (4.59)) и температура на всех тарелках колонны.

4. Уточняются величины потоков, покидающих тарелки колонны, по уравнениям общего материального и теплового балансов (уравнения (7.240), (7.242), (7.243), (7.244)).

5. Вычисляются невязки уравнений материального баланса (7.241).

6. Находятся приращения концентраций компонентов Δx_{ij} путем решения системы уравнений (7.254).

7. Приводится коррекция величин приращений и определяются новые значения концентраций компонентов по уравнению

$$X^{(n+1)} = X^{(n)} + \alpha \Delta X^{(n)}, \quad (7.281)$$

где α — корректирующий фактор.

8. Осуществляется проверка условий окончания расчетов $r_{ij} < \epsilon_1$ и $\Delta x_{ij} < \epsilon_2$ для всех $1 \leq i \leq k$ и $1 \leq j$ (здесь ϵ_1 и ϵ_2 — точность расчета). Если указанные условия не выполняются, то при вновь вычисленных профилях концентраций и температур расчет повторяется с п. 2.

В виду сложности постановки задачи (учет неидеальности жидкости и расслаивания по высоте колонны, эффективности тарелок и изменения потоков фаз) метод расчета является времемемким, а сама программа занимает большой объем памяти. Его применение целесообразно в тех случаях, когда в колоннах априори известно, что имеется расслаивание жидкой фазы. При

расчете основное время тратится на определение равновесия концентраций фаз. При задании в качестве начального профиля концентраций состава питания решение достигается за 6—10 итераций.

В случае расчета системы взаимосвязанных колонн для каждой из них записывается собственная матрица коэффициентов, диагональные элементы которой соответствуют связующим потокам. В этом случае изменяются граничные условия, что обусловлено топологией комплекса колонн. При расчете комплекса взаимосвязанных колонн удобно ввести общую нумерацию ступеней с первой тарелки первой колонны и до последней тарелки последней колонны, сохраняя для каждой из них собственную нумерацию. Рассмотренный алгоритм достаточно универсален и позволяет проводить расчет смесей без расслаивания жидкой фазы. В этом случае соотношения (7.240) — (7.242) и алгоритм расчета фазового равновесия существенно упрощаются.

Алгоритм расчета ректификации с химической реакцией. Процессы получения новых веществ (реакторные процессы) и выделения продуктов заданного качества являются основными в химической промышленности. Продукты реакции, попадая в ректификационную колонну, подвергаются воздействию высоких температур и давлений с интенсивным взаимодействием потоков пара и жидкости. Если учесть, что в смеси присутствуют или вновь появляются вещества, способствующие протеканию побочных реакций, что приводит к загрязнению целевых продуктов, то становится очевидной необходимость учета возможности появления дополнительных относительно исходного питания компонентов и организации соответствующим образом процесса. Последнее особенно важно при получении продуктов высокой чистоты. Протекание химических реакций одновременно с ректификацией не является чем-то исключительным в повседневной практике эксплуатации промышленных процессов. Это полимеризация, выделение смолистых осадков, появление неидентифицируемых примесей в продуктах разделения и появление ряда других внешних признаков наличия химической реакции. Знание условий протекания таких реакций позволяет заранее принять соответствующие меры, предохраняющие целевые продукты и аппаратуру от загрязнения.

Вместе с тем иногда целесообразно экономически, например, по энергетическим затратам, организовывать совмещенный реакторно-ректификационный процесс в одном аппарате с непосредственным использованием тепла реакции для ведения процесса ректификации.

В отечественной и зарубежной литературе исследованию совмещенных реакторно-ректификационных процессов уделяется достаточно внимания. При этом рассматриваются различные аспекты этой проблемы. Наибольшее число публикаций связано с

изучением массопередачи, сопровождаемой химической реакцией [65—68]. Эти исследования большей частью носят теоретический характер и до настоящего времени не доведены до практической реализации в силу сложности математического описания. Другим аспектом проблемы, развиваемым в работах [83, 84], является определение условий совмещения процессов и переходности разделяющих многообразий дистилляции и ректификации, распространение термодинамико-топологического метода синтеза на совмещенные процессы, исследование влияния химической реакции на структуру диаграмм фазового равновесия. И, наконец, публикации, связанные с разработкой методов расчета реакторно-ректификационных процессов [85, 86].

Особенность совмещенных процессов состоит в том, что, помимо фазового равновесия, необходимо рассматривать и химическое равновесие. А это значит, что необходимо исследовать кинетику возможных химических реакций в условиях, создаваемых при ректификации. Следует заметить, что при медленных химических реакциях и при низких тепловых эффектах процесс практически не отличается от обычной ректификации. Имеющееся отличие будет сказываться лишь при большом времени пребывания реагентов и проявляться в накоплении продуктов побочных реакций в продуктах разделения. При наличии же больших тепловых эффектов и скоростей реакций могут быть совершенно неожиданные результаты. Так, при экзотермической реакции с большим тепловым эффектом возможно полное испарение потока жидкости в зоне реакции и, наоборот, при эндотермической — охлаждение жидкости и конденсация парового потока. Поэтому при попытке совмещения ректификации и реакции важнейшей задачей является обеспечение условий нормального функционирования процесса, т. е. его устойчивости и управляемости. Отсюда следует, что хеморектификация протекает в более жестких границах изменения основных технологических параметров. Выход за допустимые границы (например, по теплоотводу) может привести к взрыву в случае сильно экзотермической реакции и останову процесса массообмена между потоками пара и жидкости в случае эндотермической реакции. Интересным моментом является то, что возникает проблема рационального использования выделяемого тепла внутри схемы, например, на образование парового потока с целью снижения энергетических затрат на ведение процесса.

Для эффективного исследования возможностей совмещенного процесса ректификации и химической реакции, очевидно, необходимо располагать математической моделью, позволяющей воспроизводить его особенности, причем не только в статике, но и в динамике. Последнее обусловлено тем, что необходимо иметь полную информацию о стратегии пуска и останова производства, т. е. иметь динамические характеристики объекта. Исходя из

необходимости исследования и оценки влияния тепловых эффектов реакций была предпринята попытка разработки динамической модели совмещенного процесса, основанной на решении системы дифференциальных уравнений материального и теплового балансов численными методами [86].

В нестационарных условиях число компонентов, поступающих на тарелку и покидающих ее, не равны между собой, и это различие складывается из количества жидкости, находящейся на тарелке. Помимо этого, за счет протекания химической реакции происходит появление новых компонентов или уменьшение реагентов исходной смеси. Таким образом, для нестационарных условий ректификации с химической реакцией уравнение покомпонентного материального баланса тарелки запишется в виде

$$\frac{d}{dt}(u_j x_{ij} + G_j y_{ij}) = L_{j+1} x_{j+1} + V_{j-1} y_{i,j-1} - (L_j + S L_j) x_{ij} - (V_j - S V_j) y_{ij} + F x_{F,ij} + \alpha_i u_j r_j, \quad (7.282)$$

где r_j — скорость химической реакции; α_j — стехиометрические коэффициенты.

Удерживающая способность тарелки по пару G_j пренебрежимо мала по сравнению с удерживающей способностью по жидкости, и ее можно без потери точности не рассматривать. Тогда при допущении, что удерживающая способность по жидкости u_j постоянная и состав жидкости, покидающей тарелку, равен составу удерживаемой на ней, уравнение (7.282) можно записать в виде

$$\frac{dx_{ij}}{dt} = \frac{1}{u_j} (V_{j-1} y_{i,j-1} - (L_j + S L_j) x_{ij} - (V_j + S V_j) y_{ij} + L_{j+1} x_{i,j+1} + F_j x_{F,ij} + \alpha_i u_j r_j). \quad (7.283)$$

Соответственно уравнение теплового баланса тарелки с учетом химической реакции запишется

$$V_{j+1} h_{j+1} - (L_j + S L_j) h_j - (V_j + S V_j) H_j + L_{j+1} h_{j+1} + F_j h_{F,j} + u_j r_j Q_x = 0, \quad (7.284)$$

где Q_x — тепловой эффект реакции.

Другими уравнениями математического описания совмещенного реакционно-ректификационного процесса являются соотношения для расчета фазового равновесия (4.22), (7.118), уравнения общего материального и теплового балансов (4.57), (4.58), уравнения для расчета скорости химических реакций и состава пара, покидающего тарелку (4.59), а также соотношения для куба и дефлегматора колонны.

Простейшим методом решения системы уравнений (7.283) является метод Эйлера при вычислении производной dx_{ij}/dt в точке

$t + \Delta t$, т. е. интегрирование по формуле

$$x_{ij}^{(n+1)} = x_{ij}^{(n)} + \Delta t dx_{ij}^{(n+1)}/dt. \quad (7.285)$$

Тогда, подставляя (7.283) в (7.285), получим

$$A_j^{(n+1)} x_{ij-1}^{(n+1)} + B_j^{(n+1)} x_{ij}^{(n+1)} + C_j^{(n+1)} x_{ij+1}^{(n+1)} = D_j, \quad (7.286)$$

где

$$\begin{aligned} A_j &= \mu_j V_{j-1}^{(n+1)} K_{ij-1}^{(n+1)}; \quad B_j = -\mu_j ((L_j^{(n+1)} + SL_j) + \\ &+ (V_j^{(n+1)} + SV_j) K_{ij}^{(n+1)}) + 1; \quad C_j = \mu_j L_{j+1}^{(n+1)}; \quad D_j = \\ &= -(x_{ij}^{(n)}) + \mu_j F_j x_{F_{ij}} + (\mu_j/u_j) \alpha_i z_j; \end{aligned}$$

здесь $\mu_j = \Delta t/u_j$ — фактор релаксации, т. е. систему нелинейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей коэффициентов, решение которой можно выполнить по методу, изложенному в разд. 7.3.2.

Формула (7.285) является частным случаем формулы

$$x_{ij}^{(n+1)} = x_{ij}^{(n)} + \Delta t \left(\beta \frac{dx_{ij}^{(n+1)}}{dt} + (1 - \beta) \frac{dx_{ij}^{(n)}}{dt} \right) \quad (7.287)$$

при $\beta = 1/2$. Используя для интегрирования системы уравнений (7.283) формулы (7.287), будем иметь

$$A_j^{(n+1)} x_{ij-1}^{(n+1)} + B_j^{(n+1)} x_{ij}^{(n+1)} + C_j^{(n+1)} x_{ij+1}^{(n+1)} = D_j, \quad (7.288)$$

где

$$\begin{aligned} A_j &= \mu_j \beta V_{j-1}^{(n+1)} K_{ij-1}^{(n+1)}; \quad B_j = -\mu_j \beta ((L_j^{(n+1)} + SL_j) + \\ &+ (V_j^{(n+1)} + SV_j) K_{ij}^{(n+1)}) + 1; \quad C_j = \mu_j \beta L_{j+1}^{(n+1)}; \\ D_j &= -[(1 - \beta) dx_{ij}^{(n)}/dt + \beta (F_j x_{F_{ij}} + \alpha_i u_j z_j)] \mu_j - x_{ij}^{(n)}. \end{aligned}$$

Основной задачей при использовании формул Эйлера, Рунге—Кутты и т. д. для решения системы (7.288) является выбор шага интегрирования, или фактора релаксации. При малых значениях последнего сходимость решения монотонная, но медленная. В случае же больших значений μ возможно появление колебательности и даже расходимости решения. Система уравнений баланса является жесткой, т. е. имеет сильно различающиеся по абсолютной величине собственные значения. Поэтому ее решение существенно зависит от величины шага интегрирования. Очевидно, должно существовать оптимальное значение фактора релаксации, величина которого определяется собственными значениями матрицы системы уравнений и в конечном итоге количеством и концентрацией компонентов на тарелке. При расчете по формулам (7.288) фактор релаксации определяется через собственные зна-

чения по формулам

$$\mu_j = 2/(\lambda_{\max} |u_j|); \quad (7.289)$$

$$\beta = \frac{1}{\Delta t |\lambda_0|} - \frac{1}{\exp(\Delta t |\lambda_0|) - 1}, \quad (7.290)$$

где

$$\lambda_{\max} = \max 2((L_j + V_j K_{ij})/u_j); \quad \lambda_0 = 0,5 |\lambda_{\max}|.$$

Другой подход к определению фактора релаксации, основанный на физических предположениях и учитывающий изменение количества жидкости на тарелках колонны, состоит в следующем. Принимается [87], что количество молей i -го компонента, поступающего или отбираемого с j -й тарелки в течение интервала интегрирования, не должно превышать количества молей компонента, удерживаемого на тарелке, т. е.

$$u_j x_{ij}^{(n)} > \Delta t_{ij}^{(n)} g_{ij}^{(n)}, \quad (7.291)$$

где $g_{ij}^{(n)}$ — количество i -го компонента, поступающее или отбираемое с тарелки. Тогда

$$\mu_{ij}^{(n)} \leq x_{ij}^{(n)}/g_{ij}^{(n)} \quad \text{или} \quad \mu_{ij}^{(n)} = (1 - \xi) x_{ij}^{(n)}/g_{ij}^{(n)}, \quad (7.292)$$

где $0 \leq \xi \leq 1$.

Наиболее приемлемым способом оценки фактора релаксации с точки зрения минимума числа итераций является формула

$$\mu_{ij}^{(n)} = (1 - \xi) x_{ij}^{(n)} / \max \{V_{j-1}^{(n)} y_{i,j-1}^{(n)}, L_{j+1}^{(n)} x_{i,j+1}^{(n)}, F_j x_{F,j}, (L_j^{(n)} + SL_j) x_{ij}^{(n)}, (V_j^{(n)} + SV_j) y_{ij}^{(n)}\}. \quad (7.293)$$

Таким образом, фактор релаксации является переменной величиной, зависящей от количества компонента, поступающего на тарелку или покидающего ее на каждой итерации.

Итак, алгоритм расчета совмещенного реакторно-ректификационного процесса состоит в следующем.

1. Задаются начальные профили концентраций компонентов по жидкости и величины потоков.

2. По известным потокам и составам определяются факторы релаксации, по кинетическим уравнениям — скорости химической реакции и коэффициенты матрицы системы уравнений материального баланса (7.288).

3. Путем решения системы уравнений (7.288) вычисляется профиль концентраций компонентов по высоте колонны. Пункты 2—3 повторяются для всех компонентов исходной смеси.

4. Полученные концентрации компонентов корректируются, после чего определяются профили концентраций пара и температуры по высоте колонны.

5. Рассчитываются потоки пара по уравнению теплового баланса и жидкости по уравнению материального баланса.

6. Если решение достигнуто, то, начиная с п. 2, расчеты повторяются при новом значении независимой переменной.

Метод релаксации, рассмотренный применительно к расчету хемореактивной колонны, отличается тем, что обладает медленной по сравнению с другими методами, но устойчивой сходимостью. Это обстоятельство позволяет поставить вопрос о создании алгоритма для расчета различных массообменных аппаратов и их комплексов (ректификационная колонна, абсорбер, экстрактор, испаритель, декантатор и т. д.). Основанием для создания такого алгоритма является то, что в основном алгоритмы расчета указанных аппаратов различаются описанием фазового равновесия, а также устойчивостью сходимости метода. Такой алгоритм позволяет рассматривать произвольные комплексы аппаратов различного типа, для расчета которых необходимо задать топологию системы в исходные данные [88].

7.3.4. Мембранная колонна непрерывного действия

Мембранные методы разделения веществ интенсивно развиваются и реализуются в различных отраслях промышленности. В современном химическом производстве широко распространены мембранные методы разделения газовых смесей как для получения компонентов, используемых в дальнейшей переработке, так и для выделения продуктов в процессе синтеза. Но это не означает, что все проблемы исследования мембранных процессов газоразделения уже решены. Например, разделение в одноступенчатом мембранном процессе ввиду невысокого фактора разделения существующих мембран имеет недостаток, заключающийся в предельном обогащении на одном модуле. Однако каскад из мембранных модулей для получения высококонцентрированных продуктов требует большого числа компрессоров и сложен в управлении. Этими недостатками не обладает непрерывная мембранная колонна (НМК), содержащая обогатитель, исчерпыватель и компрессор (рис. 7.20). С помощью НМК стал возможен новый способ разделения газовых смесей, основанный на непрерывном фракционировании НМК и позволяющий получить как легкопроницающие компоненты (ЛПК), так и труднопроницающие компоненты (ТПК). В принципе с помощью НМК может быть обеспечено почти полное разделение бинарной газовой смеси, даже если проницаемость и селективность применяемых мембран относительно низки. В них могут применяться как пористые, так и непористые мембраны в виде полых волокон или пленки.

Выполняется НМК аналогично колонне с насадкой, применяемой для дистилляции, экстракции и газоабсорбции. Как и в колоннах с насадкой, в НМК существует два потока: один поток движется вверх, а другой — вниз, однако в НМК эти два потока

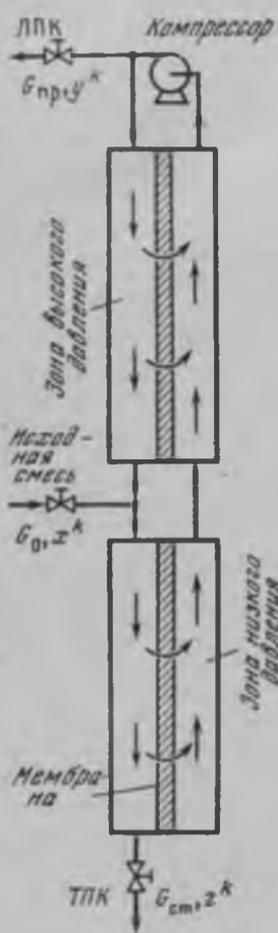


Рис. 7.20. Мембранная колонна непрерывного действия

разделяются мембраной, обладающей избирательной проницаемостью.

Разделяемая смесь под давлением вводится в НМК в точке соединения зон высокого давления обогатителя и исчерпывателя. По мере того как смесь движется вниз в зоне высокого давления исчерпывателя, она обедняется ЛПК за счет более высокой скорости его проникания. Непроникший через мембрану поток выводится из НМК как продукт, обогащенный ТПК. Проникший поток, проходя противотоком в зоне низкого давления исчерпывателя, попадает в аналогичную зону обогатителя и, обогатившись, проникает ЛПК в этой части НМК, подается на компрессор. Часть потока после компримирования выводится из колонны в качестве продукта, обогащенного ЛПК, а остальной поток поступает на вход зоны высокого давления обогатителя. В результате циркуляции потока в НМК происходит многократное проникание газовой смеси через мембрану, что приводит к концентрированию компонентов разделяемого потока на противоположных концах колонны, в результате чего разделение ведется непрерывно. Достигаемая степень разделения зависит от скорости потока, фактора разделения, перепада давления на мембране и площади мембраны. Следует отметить, что для получения высокой степени разделения необходима высокая степень внутреннего рецикла.

Для исследования работы мембранной колонны непрерывного действия необходимо получить ее математическую модель. Для составления математического описания выделим и рассмотрим элементарный участок Δl мембраны по длине аппарата l (рис. 7.21).

Для элементарного участка составляется материальный баланс, в котором учитывается, что концентрация газовой смеси в зоне высокого и низкого давлений меняется по длине. Поскольку отрезок Δl очень мал, то dG^k/dl можно считать постоянным на всем участке Δl . Если G_v^k — поток k -го компонента на входе

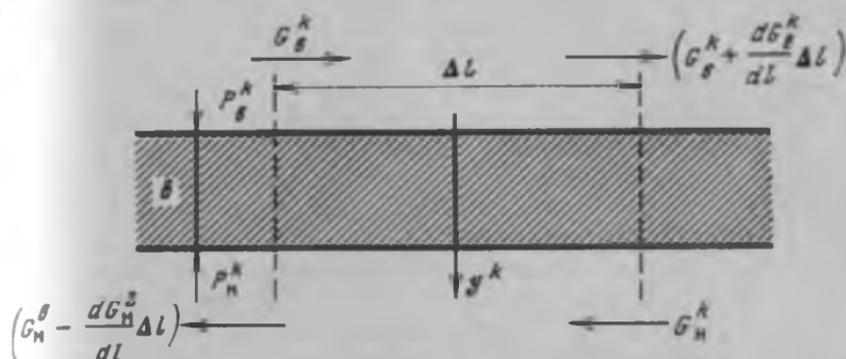


Рис. 7.21. К выводу расчетных соотношений

элементарного участка в зоне высокого давления, то выходной поток этого компонента можно представить следующим образом:

$$(G_n^k + dG_n^k \Delta l / dl). \quad (7.294)$$

Если за положительное принять направление, совпадающее с движением потока в зоне высокого давления (зона ВД), то для зоны низкого давления (зона НД) поток компонента k на выходе элементарного участка аппарата запишется в виде

$$(G_n^k - dG_n^k \Delta l / dl). \quad (7.295)$$

Площадь мембраны, через которую газ диффундирует из зоны ВД в зону НД на участке Δl , равна $W\Delta l$, где W — ширина мембраны. Известно, что скорость проникания каждого компонента газовой смеси зависит от коэффициентов проницаемости компонента P^k , толщины мембраны δ и ее площади, а также парциальных давлений этих компонентов в зонах аппарата:

$$J^k = P^k (W\Delta l / \delta) (P_s^k - P_n^k). \quad (7.296)$$

Парциальные давления компонентов зависят от их содержания в газовой смеси и общего давления смеси:

$$P_s^k = x^k P_s \text{ и } P_n^k = y^k P_n. \quad (7.297)$$

Материальный баланс каждого компонента газовой смеси в зоне ВД запишется так:

$$G_s^k = (G_s^k + dG_s^k \Delta l / dl) + J^k. \quad (7.298)$$

Если рассматривается стационарный процесс газоразделения, то в выражении материального баланса отсутствует член с производной расхода компонента по времени и оно приводится к виду

$$dG_s^k / dl = -J^k / \Delta l. \quad (7.299)$$

Аналогично составляется материальный баланс для проникающего газа. Полное математическое описание мембранной колонны непрерывного действия может быть получено соединением математических описаний исчерпывателя и обогатителя с учетом внешнего потока питания и потока рецикла.

Рассмотрим мембранную колонну непрерывного действия мембраной в виде полого волокна с внутренним r_n и наружным r_n радиусами.

Основными уравнениями математического описания в этом случае являются уравнения проникновения газового потока через мембрану, уравнение массового баланса для бесконечно малого элемента колонны и уравнение продольного осевого перепада давления. Для бинарной газовой смеси эти уравнения будут иметь вид

$$\frac{dG}{dl} = - \frac{2\pi N}{\ln(r_n/r_b)} \{ P^{(1)}(xP_B - yP_H) + P^{(2)}[(1-x)P_B - (1-y)P_H] \}; \quad (7.300)$$

$$\frac{dx}{dl} = \left[\frac{2\pi N P^{(1)}(P_B x - P_H y)}{\ln(r_n/r_b)} - x \frac{dG}{dl} \right] G; \quad (7.301)$$

$$\frac{dP_B^{(1)}}{dl} = - \frac{8\mu KRTG}{\pi N r_b^3}. \quad (7.302)$$

В этих выражениях вязкость μ изменяется вдоль оси и должна рассчитываться в каждой точке. Используя при этом среднюю вязкость, μ можно рассчитать из уравнения

$$\mu = \mu' y + \mu'' (1 - y).$$

Температура в системе предполагается постоянной, так же как и давление в межкапиллярном пространстве. Кроме приведенных дифференциальных уравнений в математическое описание входят уравнения общего и покомпонентного материального баланса

$$G_0 = G_{пр} + G_{ст}; \quad G_0 x^k = G_{пр} y^k + G_{ст} z^k. \quad (7.303)$$

Расчет колонны начинается с расчета исчерпывателя и ведется от дна колонны, так как, во-первых, числовое интегрирование становится неустойчивым, если расчет начинается сверху исчерпывателя, и, во-вторых, скорости потоков вблизи компрессора трудно точно определить.

Все значения граничных условий задаются из экспериментальных данных, за исключением состава в проникающем потоке на дне исчерпывателя в зоне низкого давления. Этот состав не может быть определен экспериментально, но может быть оценен исходя из уравнения проникновения в предположении поперечной организации потока в конечном элементе площади мембраны. Скорость

потока каждого компонента выразится следующим образом:

$$y_B \frac{dG}{dl} = \frac{2\pi N}{\ln(r_n/r_b)} P^{(1)}(P_B x_B - P_H y_B); \quad (7.304)$$

$$(1 - y_B) \frac{dG}{dl} = \frac{2\pi N}{\ln(r_n/r_b)} P^{(2)}[(1 - x_B)P_B - (1 - y_B)P_H]. \quad (7.305)$$

При делении одного уравнения на другое получают квадратное уравнение относительно y_B , которое легко решается:

$$\frac{y_B}{1 - y_B} = \frac{P^{(1)}}{P^{(2)}} \left\{ \frac{x_B P_B - y_B P_H}{(1 - x_B)P_B - (1 - y_B)P_H} \right\}. \quad (7.306)$$

После задания всех граничных условий дифференциальное уравнение интегрируется методом Рунге—Кутты четвертого порядка. Интегрирование проводится по всей длине исчерпывателя. Для перехода к расчету обогатителя в месте соединения его с исчерпывателем необходимо определить новые граничные условия. Поскольку весь проникший поток исчерпывателя подается в зону низкого давления обогатителя, условия на его входе идентичны условиям на выходе исчерпывателя. Выходной поток из зоны ВД обогатителя, смешиваясь с входным разделяемым потоком, образует входной поток зоны ВД исчерпывателя. Таким образом, используя общий и покомпонентный материальный баланс в точке подачи разделяемой смеси, определяются граничные условия на выходе зоны ВД обогатителя и проводится интегрирование по всей его длине.

Пошаговое числовое интегрирование позволяет получить полную информацию о профиле состава, профиле давления и распределении скорости потоков по мембранной колонне непрерывного действия.

Пример. Для расчета мембранной колонны вводятся исходные данные: количество компонентов разделяемой смеси, количество капилляров в пучке, внутренний и наружный радиусы капилляров, величины высокого и низкого давлений, расход сбросного потока исчерпывателя и состав смеси этого потока, расход в межкапиллярном пространстве внизу исчерпывателя, скорость исходного потока и состав разделяемой смеси, коэффициенты проницаемости каждого компонента, параметры настройки метода Рунге—Кутты четвертого порядка с автоматическим выбором шага. Рассчитывается мембранная колонна, у которой обогатитель и исчерпыватель содержат по 35 силиконовых капилляров с внутренним диаметром 238 и внешним 610 мкм, помещенных в металлический кожух. Общая длина колонны 5,12 м. Поток разделяемой смеси подается в точку, находящуюся на расстоянии 2 м от низа колонны. Исходный поток содержит 54,8% CO_2 и 45,2% N_2 и подается в мембранную колонну со скоростью 0,237 см³/с. Разделяемая смесь подается под давлением 0,22 МПа в зоне НД поддерживается 0,1 МПа. Коэффициент проницаемости мембраны из силиконового каучука для CO_2 составляет 1000, а для азота 10,6 моль·м/(м²·с·Па), т. е. селективность мембраны для газов CO_2 и N_2 равна 11,6.

В результате расчета получают профили концентраций в капилляре и межкапиллярном пространстве, величины потоков на выходах из колонны, перепад давления вдоль капилляров и величину потока рецикла, определяющую

щего энергетические затраты процесса разделения. Профиль концентрации в межкапиллярном пространстве, полученный в результате расчета и экспериментальных исследований, приведенных в работе [89], показан на рис. 7.22. В результате расчета определено, что на выходе сверху колонны продукт обогащенный ТПК, содержит 94,5% CO_2 при расходе 0,108 $\text{см}^3/\text{с}$, а продукт внизу колонны, обогащенный ТПК, содержит 82,2% N_2 при расходе 0,129 $\text{см}^3/\text{с}$. Падение давления вдоль каналов капилляров не превышает 8 КПа, что составляет около 4% от исходного давления. Нагрузка компрессора равна 1,96 $\text{см}^3/\text{с}$.

Статическая математическая модель НМК не позволяет анализировать работу в динамическом режиме, определять оптимальные условия пуска, исследовать процесс разделения в режиме вынужденных колебаний и т. п. В работе [90] рассмотрен метод расчета процесса газоразделения, позволяющий исследовать разделение многокомпонентных смесей при всех известных ориентациях потоков как в стационарном, так и в нестационарном режимах. Основой метода является то, что концентрации $C^k(l, t)$ каждого компонента смеси удовлетворяют системе уравнений в виде

$$\frac{\partial C^k}{\partial t} = -\partial(uC^k)/\partial l \pm J^k, \quad (7.307)$$

где u — линейная скорость потока; l — текущая координата вдоль мембраны; J^k — скорость проникания k -го компонента через единицу поверхности мембраны.

Так как получение аналитического решения задачи невозможно, а моделирование на ЭВМ процессов, описываемых системой уравнений типа (7.307) связано с известными трудностями, то зоны разделительного аппарата представляются совокупностью ячеек идеального перемешивания. Известно, что применение такой модели справедливо для некоторых аппаратов с непрерывно распределенными параметрами. В этом случае мембранная колонна непрерывного действия разбивается на N участков (рис. 7.23), в каждом из которых принимается, что концентрация во всем объеме участка не меняется из-за малого пути прохождения потока вдоль мембраны и отсутствия перемешивания между ячейками.

Поскольку в каждой ячейке поток находится в состоянии идеального перемешивания, то для любой i -й ячейки справедливо уравнение модели идеального перемешивания с добавлением члена, учитывающего перенос массы через мембраны. Система таких уравнений, представляющих собой математическое описание изменения концентрации смеси в каждой из принятых N ячеек, является системой уравнений ячейочной модели (рис. 7.24).

Рассмотрим ячейку с номером i как емкость, в которую из $(i-1)$ -й ячейки поступает газовая смесь с известным составом C_{i-1} . Часть поступившего в i -ю ячейку газа проникает через мембрану в $(N+i)$ -ю ячейку, а оставшаяся часть переходит в следующую $(i+1)$ -ю ячейку. Величина проникающего потока J_i^k компонента k из i -й ячейки в $(N+i)$ -ю определится из выра-

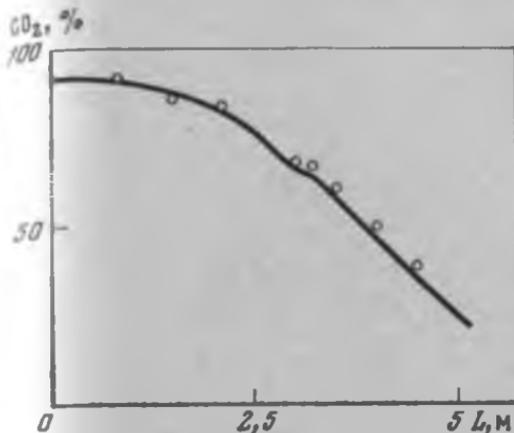


Рис. 7.22. Профиль концентраций CO_2 в межканальном пространстве мембранной колонны при разделении смеси $\text{CO}_2\text{—N}_2$ (линия — расчет; точки — эксперимент)

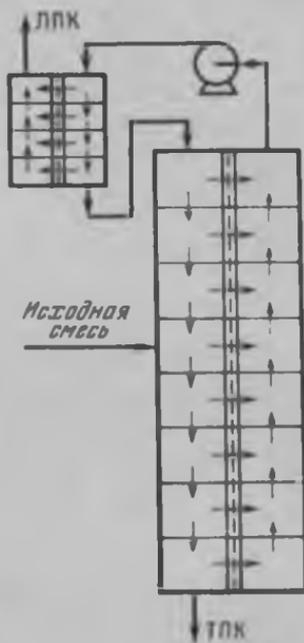


Рис. 7.23. Схематическое представление мембранной колонны с дополнительным модулем в виде ячеек идеального перемешивания

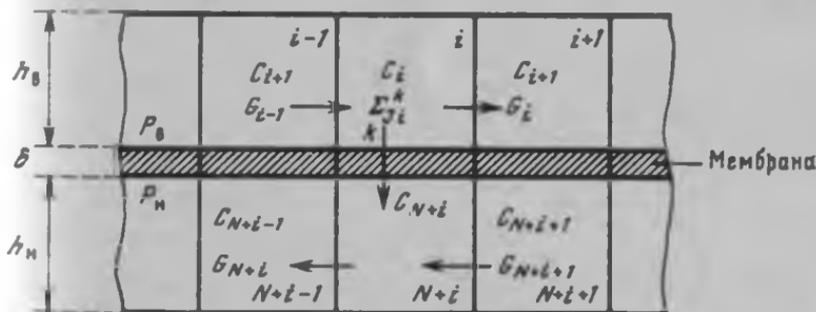


Рис. 7.24. К выводу расчетных соотношений

жения массопередачи

$$J_i^k = Q^k \Delta S (P_n c_i^k - P_n c_{N+i}^k), \quad (7.308)$$

где ΔS — площадь мембраны, разделяющая i -ю и $(N+i)$ -ю ячейки; c_i^k и c_{N+i}^k — текущие концентрации (мольные доли) k -го компонента в i -й и $(N+i)$ -й ячейках соответственно; $Q^k = P^k/\delta$ — проницаемость мембраны толщиной δ по k -му компоненту.

Остальная часть поступившего в i -ю ячейку потока переходит в $(i+1)$ -ю с расходом G_i и составом c_i . Количество компонента k , попавшего в единицу времени в i -ю ячейку с входным по-

током из $(i-1)$ -й ячейки, определится как $G_{i-1}c_{i-1}^k$, а количество ушедшего в это время из i -й ячейки компонента с выходным потоком в $(i+1)$ -ю ячейку $G_i c_i^k$. Уравнение материального баланса для каждой ячейки зон ВД и НД соответственно записываются следующим образом:

$$\Delta V_{\text{в}} dc_i^k/dt = G_{i-1}c_{i-1}^k - G_i c_i^k - J_i^k/P_{\text{в}, i}; \quad (7.308)$$

$$\Delta V_{\text{н}} dc_{N+i}^k/dt = G_{N+i+1}c_{N+i+1}^k - C_{\text{в}, i}c_{N+i}^k + J_i^k/P_{\text{н}, i}. \quad (7.309)$$

В этих уравнениях левая часть определяет изменение количества компонента k в каждой ячейке. Первый и второй члены правой части определяют накопление компонента вследствие поступления его из предыдущей ячейки и уноса в следующую, а третий — изменение количества компонента за счет проникания через мембрану.

Уравнение (7.309) необходимо дополнить граничными условиями

$$G_{2N} = \sum_{i=1}^K (J_N^k/P_{\text{в}, N}); \quad c_0^k = z^k; \quad G_{2N+1} = 0; \quad c_{2N+1}^k = 0, \quad (7.310)$$

где

$$G_i = G_{i-1} - \sum_{k=1}^K (J_i^k/P_{\text{в}, i}); \quad G_{\text{в}, i} = G_{N+i+1} + \sum_{k=1}^K (J_i^k/P_{\text{н}, i}); \quad (7.311)$$

$\Delta V_{\text{в}} = \Delta Sh_{\text{в}}$ и $\Delta V_{\text{н}} = \Delta Sh_{\text{н}}$ — объемы ячеек в зонах высокого и низкого давлений высотой $h_{\text{в}}$ и $h_{\text{н}}$ соответственно; G_i — выходной поток газовой смеси из i -й ячейки; $P_{\text{в}, i}$ и $P_{\text{н}, i}$ — давления в i -й и $(N+i)$ -й ячейках соответственно. Начальные концентрации в ячейках при $t=0$ задаются в зависимости от условия проведения процесса и, например, могут быть равными концентрациям в исходной смеси, иметь нулевые значения и т. п.

В общем случае давление в зонах высокого и низкого давлений как обогатителя, так и исчерпывателя будет меняться вдоль потока газовой смеси. Для определения давления в каждой ячейке используется уравнение Дарси, записанное для канала с проницаемыми стенками. Выражение для расчета давления в i -й ячейке зоны высокого давления будет иметь вид

$$P_{\text{в}, i} = [P_{\text{в}, (i-1)}^2 - A(G_0 - \sum_{j=0}^{i-1} G_j^{\text{нп}})] / P_{\text{в}, (i-1)}, \quad (7.312)$$

где $G_j^{\text{нп}} = \sum_{k=1}^K J_j^k/P_{\text{в}, j}$ — проникающий поток в i -й ячейке и $G_0^{\text{нп}} = 0$. Параметр A определяется типом проницаемого канала и равен $A = 12LM/(Nh^3W)$ для плоского канала длиной L и

шириной W , а для мембраны в виде пучка капиллярных трубок с внутренним радиусом r_l будет $A = 8LM/(\pi M r_n^4)$, где M — число капиллярных трубок в пучке.

Аналогично записывается выражение, определяющее давление в ячейках зоны НД. Выражение зависит от организации потока и для противотока в мембранной колонне непрерывного действия имеет вид

$$P_{ni} = (P_{n(i-1)}^2 + A \sum_{j=1}^N G_j^{np}) / P_{n(i-1)} \quad (7.312a)$$

при условии $P_{n0} = P_{\text{вых}}$, где $P_{\text{вых}}$ — давление на выходе из зоны НД мембранной колонны.

Система $2k$ дифференциальных уравнений (7.309) и (7.309a) с заданными начальными условиями решается на ЭВМ с использованием соотношений (7.310), (7.311), (7.312), (7.312a) методом Рунге—Кутты четвертого порядка с автоматическим выбором шага.

В качестве примера с помощью динамической модели рассчитывался процесс разделения ранее описанной смеси CO_2 — N_2 в мембранной колонне с дополнительным модулем, включенным между выходом компрессора и входом в зону высокого давления обогатителя (рис. 7.23). При прочих неизменных условиях проведения процесса определялись длина колонны и элемента и нагрузка компрессора. Результаты расчета показали, что при тех же количествах и составах продуктов длина колонны с модулем уменьшается более чем в два раза и составляет 2,35 м, а поток рецикла снижается почти в четыре раза и равен 0,42 см³/с.

7.3.5. Расчет теплообменного оборудования

Доля теплообменного оборудования в химических производствах достаточно высокая. Например, каждая из ректификационных колонн, как минимум, снабжена двумя теплообменниками: конденсатором и кипятильником. Их количество может быть намного больше, если на стадии проектирования принимаются меры по рациональному использованию энергии. Это многоступенчатая конденсация пара, промежуточные холодильники и т. д. От эффективной работы теплообменной аппаратуры существенно зависит степень использования тепловой энергии. Важно не только точно рассчитать теплообменник, но и обеспечить нормальные условия эксплуатации с высокими коэффициентами теплопередачи. Несмотря на простоту конструкции и достаточную изученность процесса теплопереноса, эксплуатация теплообменной аппаратуры в промышленных условиях довольно напряженная. Трудность состоит в обеспечении высоких коэффициентов теплопередачи, что часто покрывается большими запасами по поверхности тепло-

обмена. Среди проблем, которые возникают при эксплуатации кипятильников, можно отметить удаление инертных газов теплоносителя, снижающих существенно коэффициент теплопередачи, поддержание требуемого уровня жидкости для исключения пленочного кипения и потери термосифонного эффекта, обеспечение высокой скорости циркуляции жидкости для снижения загрязнений поверхности за счет примесей или полимеризации и исключения пульсаций, обеспечение высокой движущей силы процесса теплопередачи. Аналогичные проблемы возникают и при эксплуатации конденсаторов. Поэтому задача состоит не только в обеспечении нормальных условий работы, но и в правильном выборе теплообменной аппаратуры в зависимости от сред.

Постановка задачи проектного расчета теплообменного оборудования обычно формулируется следующим образом.

Для каждого аппарата на стадии технологического расчета определены начальная и конечная температуры основного потока и его расход. Начальная температура тепло- или хладагента обычно указывается в задании на проектирование на основе имеющихся источников пара и хладагента. Данные о свойствах потоков содержатся в подсистеме информационного обеспечения, сведения об аппаратах — в каталогах оборудования. Необходимо определить требуемые поверхности теплообмена и в определенном классе аппаратов произвести выбор соответствующих конструкций из каталогов оборудования с последующей их оптимизацией с учетом ограничений, указанных в задании. Расход тепло- или хладагента для каждого аппарата определяется вместе с его конечной температурой, значение которой оптимизируется в интервале, указанном проектировщиком или выбираемом автоматически в соответствии с температурной схемой аппарата.

В основе расчета теплообменников используются методики, основанные на общем уравнении теплопередачи, записанном в дифференциальной форме:

$$dQ = G_1 C_1 dt_1 = -G_2 C_2 dt_2 = K (t_2 - t_1) dF, \quad (7.315)$$

и критериальных соотношениях.

В общем виде алгоритм представлен на рис. 7.25. Расчет поверхности теплообмена производится итерационно с уточнением температуры стенок трубы. Определение коэффициентов теплопередачи при этом производится с учетом агрегатного состояния потоков в трубах и межтрубном пространстве.

Расчет поверхности теплообмена подогревателя-холодильника. Из наиболее точных методов расчета этих теплообменников можно выделить две группы методов. Первая основана на интервально-итерационном расчете поверхности теплообмена аппарата, когда аппарат делится на некоторое число интервалов по температуре одного из потоков таким образом, что свойства потоков, зависящие

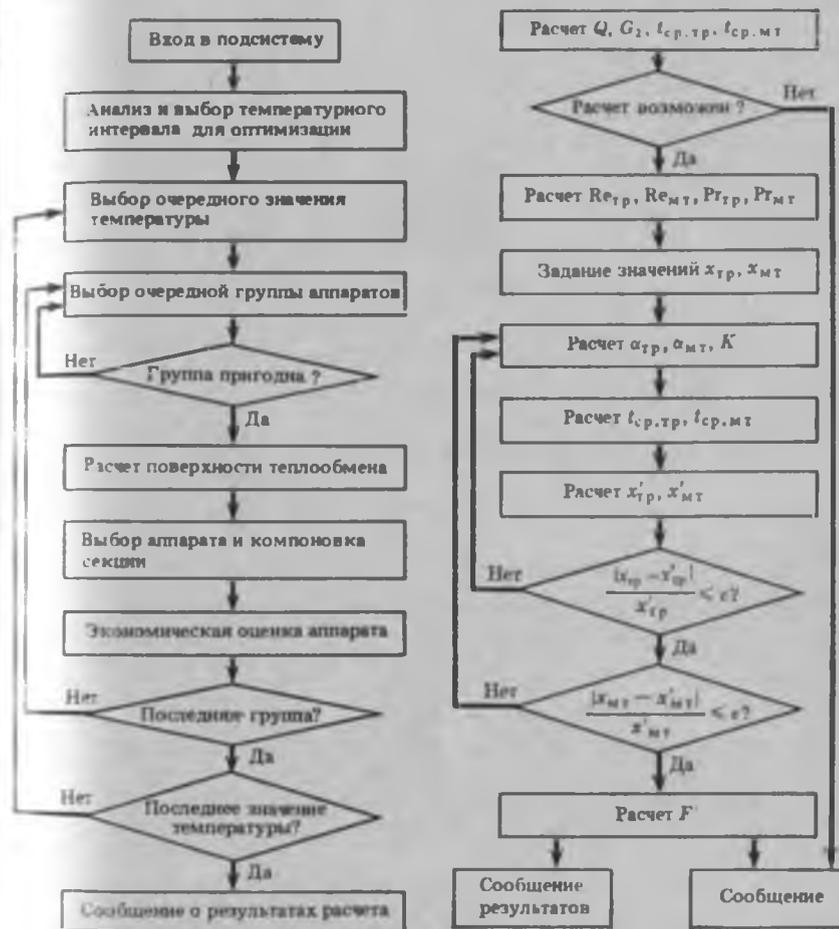


Рис. 7.25. Алгоритм расчета и выбора теплообменного аппарата

Рис. 7.26. Алгоритм расчета подогревателя-холодильника

от температуры, в каждом интервале можно считать постоянными. Для каждого интервала решается уравнение теплового баланса и определяется температура второго потока на конце интервала. В последнем интервале определяется разность между расчетными и действительными значениями температуры второго потока, и если она незначительна, то поверхность теплообмена аппарата определяется суммированием поверхностей интервалов. Если разность оказывается существенной, то число интервалов увеличивается и процедура расчета повторяется.

Методы второй группы основаны на итерационном решении уравнения теплового баланса всего аппарата с последовательным уточнением температуры стенки трубы. В основе метода используется алгоритм (рис. 7.26), изложенный в [91].

Поверхность теплообмена определяется по формуле

$$F = Q/K\Delta t_{cp}, \quad (7.314)$$

причем $Q = G_1 c_1 |t_{1н} - t_{1к}| = G_2 c_2 |t_{2н} - t_{2к}|$;

$$\Delta t_{cp} = \begin{cases} \frac{\Delta t^6 - \Delta t^м}{\ln(\Delta t^6/\Delta t^м)}, & \Delta t^6/\Delta t^м \geq 2; \\ (\Delta t^6 + \Delta t^м)/2, & \Delta t^6/\Delta t^м < 2; \end{cases} \quad (7.315)$$

Δt^6 — большая разность температур; $\Delta t^м$ — меньшая разность температур.

Коэффициент теплопередачи равен

$$K = 1 / \left(\frac{1}{\alpha_{тр}} \frac{d_2}{d_1} + \sum R_c + \frac{1}{\alpha_{мт}} \right), \quad (7.316)$$

где $\sum R_c$ — суммарное термическое сопротивление стенки трубы и загрязнений:

$$\sum R_c = R_b + \frac{\delta_{ст}}{\lambda_{ст}} + R_n; \quad (7.317)$$

R_b и R_n — термическое сопротивление внутренних и наружных загрязнений трубы; $\delta_{ст}$ — толщина стенки трубы; $\lambda_{ст}$ — коэффициент теплопроводности материала стенки.

Коэффициент теплопередачи трубного пространства для турбулентного режима при $Re > 10000$ равен

$$\alpha_{тр} = 0,23 (\lambda_{тр}/\alpha_1) Re_{тр}^{0,8} Pr_{тр}^{0,43} x_{тр}, \quad (7.318)$$

для переходного режима при $4000 < Re \leq 10000$

$$\alpha_{тр} = 0,00333 (\lambda_{тр}/d_1) Re_{тр} Pr_{тр}^{0,43} x_{тр}, \quad (7.319)$$

где $x_{тр} = (Pr_{тр}/Pr_{трст})^{0,25}$.

Коэффициент теплопередачи межтрубного пространства для пучка труб определяется по формуле [92]

$$\alpha_{мт} = K_N \cdot 0,41 (\lambda_{мт}/d_2) Re_{мт}^{0,6} Pr_{мт}^{0,33} x_{мт}, \quad (7.320)$$

где

$$K_N = \begin{cases} 1 & \text{при } N_{тр} > 100; \\ 1/N_{тр} (N_{тр} - 0,6N_1) & \text{при } N_{тр} \leq 100; \end{cases}$$

$N_{тр}$ — число труб в пучке; $N_1 = 1/2 \{[(1,2N_{тр} - 0,33)^{0,5} + 1]\}$; $x_{мт} = (Pr_{мт}/Pr_{мтст})^{0,25}$.

Все свойства потоков в межтрубном и трубном пространствах вычисляются при средней температуре. Перепады температуры соответственно определяются как

$$\Delta t_T = |t_{ср.г} - t_{ст.г}|; \quad \Delta t_{мт} = |t_{ср.мт} - t_{ст.мт}|. \quad (7.321)$$

Зависимость между температурой стенки со стороны трубного и межтрубного пространств имеет вид

$$t_{ст.мт} = t_{ст.г} + q \sum R_c; \quad q = \alpha_T \Delta t_T. \quad (7.322)$$

Средняя температура потоков теплоносителей в обоих пространствах определяется из соотношений для противотока

$$t_{ср.в} = (Rt_{1в} + t_{2в} - \Delta t_{ср})/(R + 1); \quad (7.323)$$

$$t_{ср.н} = (R(t_{2в} + \Delta t_{ср}) - t_{1в})/(R + 1);$$

для прямотока

$$t_{ср.в} = (Rt_{2в} - t_{1в} + \Delta t_{ср})/(R + 1); \quad (7.324)$$

$$t_{ср.н} = (R(t_{2в} + \Delta t_{ср}) - t_{1в})/(R + 1),$$

где $t_{1в}$, $t_{2в}$ — начальная и конечная температуры теплоносителя, воспринимающего тепло; $t_{1в}$ и $t_{2в}$ — начальная и конечная температуры носителя, отдающего тепло;

$$R = (t_{1в} - t_{2в})/(t_{2в} - t_{1в}); \quad (7.325)$$

$$P = (t_{2в} - t_{1в})/(t_{1в} - t_{2в}). \quad (7.326)$$

Средняя разность температуры для прямо- и противотока определяется по уравнению (7.315). Для смешанного потока эту величину определяют с учетом поправки

$$\varepsilon = (R^2 + 1)^{0,5} \ln \left(\frac{1-P}{1-PR} \right) / \left\{ (R - 1) \ln \left[\frac{(2-P(R+1-(R^2+1)^{0,5}))}{(2-P(R+1+(R^2+1)^{0,5}))} \right] \right\}. \quad (7.327)$$

Алгоритм расчета поверхности теплообмена заключается в поиске корня уравнения

$$f(t_{ст.г}) = t_x + q \left(\frac{1}{\alpha_x} + \sum R_c \right) - t_{ст.г} = 0, \quad (7.328)$$

где t_x и $t_{ст.г}$ — средняя температура потока холодного носителя и температура стенки со стороны горячего носителя; α_x — коэффициент теплопередачи со стороны хладагента

$$q = \alpha_x (t_x - t_{ст.х}).$$

Для вычисления α_x и q необходимо знать температуру стенки со стороны хладагента. Это значение можно найти по соотно-

шению

$$t_{ст. х} = t_{ст. г} - q \sum R_c. \quad (7.328)$$

В результате решения уравнения (7.328) находятся температуры стенок, коэффициенты теплоотдачи и удельная тепловая нагрузка, после чего легко вычислить поверхность теплообмена.

Расчет поверхности конденсатора. Алгоритм предназначен для теплового расчета дефлегматора парогазовой смеси и представляется собой дальнейшую разработку алгоритма, предложенного в работе [92]. Рассматривается случай конденсации в межтрубном пространстве горизонтального дефлегматора с сегментными перегородками. Считается, что аппарат состоит из двух зон: зоны охлаждения парогазовой смеси и зоны конденсации

$$F = F_k + F_o, \quad (7.330)$$

необходимая поверхность которых определяется отдельно:

$$F_k = Q_k R_k / \Delta t; \quad F_o = Q_o R_o / \Delta t_o; \quad (7.331)$$

$$Q_k + Q_o = Q, \quad (7.332)$$

где Q_k , Q_o , Q — тепловые нагрузки на зоны конденсации, охлаждения и аппарата в целом. Кроме того, в обеих зонах происходит охлаждение остаточного газа.

Разности температур в зонах определяются по формулам

$$\Delta t_k = \frac{|t_{2гп} - t_{1гп}| - |t_{1мт} - t_{2гп}|}{\ln [|t_{2мт} - t_{1гп}| / |t_{1мт} - t_{2гп}|]}; \quad (7.333)$$

$$\Delta t_o = \frac{|t_{1мт} - t_{2гп}| - |t_{п.мт} - t_{гп}|}{\ln [|t_{1мт} - t_{2гп}| / |t_{п.мт} - t_{гп}|]}; \quad (7.334)$$

где $t_{п.мт}$ — температура парогазовой смеси, при которой температура стенки со стороны межтрубного пространства $t_{ст.мт}$ равна температуре точки росы смеси $t_{р.мт}$. Эта температура, по которой аппарат делится на две части, определяется по формуле

$$t_{п.мт} = (t_{р.мт} \alpha_o - t_{2мт} / R_o) / (\alpha_o - 1 / R_o). \quad (7.335)$$

При таком подходе охлаждение остаточного газа включается в зону охлаждения. Температурная нагрузка зоны охлаждения равна

$$Q_o = G_{1мт} c_{мт} (t_{1мт} - t_{п.мт}), \quad (7.336)$$

где $G_{1мт}$, $c_{мт}$ — количество и теплоемкость парогазовой смеси на входе в аппарат.

При расчете аппарата считается, что зона охлаждения в парате есть, если температура стенки со стороны межтрубного пространства $t_{ст.мт}$ — больше точки росы парогазовой смеси, т. е.

$$t_{ст.мт} > t_{р.мт}. \quad (7.337)$$

При этом температура стенки определяется как

$$t_{ст. мт} = t_{1мт} - (t_{1мт} - t_{2тр}) / (R_0 \alpha_0). \quad (7.338)$$

Если неравенство (7.337) не выполняется, то зоны охлаждения нет.

Суммарные термические сопротивления определяются по формулам

$$R_0 = \frac{1}{\alpha_{тр}} \frac{d_2}{d_1} + \sum R_c + \frac{1}{\alpha_0}; \quad (7.339)$$

$$R_k = \frac{1}{\alpha_{тр}} \frac{d_2}{d_1} + \sum R_c + \frac{1}{\alpha_0} \frac{Q_2}{Q} + \frac{1}{\alpha_k}, \quad (7.340)$$

где $\alpha_{тр}$ и α_k — коэффициенты теплоотдачи хладагента и при конденсации пара соответственно. Теплота охлаждения остаточного газа равна

$$Q_r = G_{2мт} C_{мт} (t_{1мт} - t_{2мт}), \quad (7.341)$$

где $G_{2мт}$ — количество парогазовой смеси на выходе аппарата. При конденсации чистого пара принимается, что $G_{2мт} = 0$.

Для определения коэффициента теплоотдачи трубного пространства используются формулы (7.318) и (7.319). При этом температура стенки со стороны трубного пространства вычисляется как

$$t_{ст. тр} = (t_{2тр} + t_{1тр}) / 2 + \Delta t_k / (R_k \alpha_{тр}). \quad (7.342)$$

Все свойства теплоносителя в трубном пространстве вычисляются при средней температуре потока.

Расчет коэффициентов теплоотдачи в межтрубном пространстве в зоне охлаждения выполняется по уравнениям [92]

$$\alpha_0 = 4 \lambda_{мт} / d_2, \quad (7.343)$$

$$\alpha_0 = 0,3 \lambda_{мт} / d_2 \text{Re}_0^{0,56} \text{Pr}_0^{0,3} \left(\frac{\text{Pr}_0}{\text{Pr}_{ст}} \right)^{0,25}, \quad 100 < \text{Re} \leq 200 \text{000}. \quad (7.344)$$

Величина $\text{Pr}_{ст}$ рассчитывается при температуре стенки со стороны межтрубного пространства.

Коэффициент теплоотдачи межтрубного пространства в зоне конденсации рассчитывается по соотношению [93]

$$\alpha_k = 0,725d \sqrt{g r \rho^2 k^3 / \mu \Delta t \alpha}. \quad (7.345)$$

где d — наружный диаметр труб; g — ускорение силы тяжести; Δt — разность температур $t_{конд} - t_{ст. мт}$. В этой формуле все свойства конденсата определяются при температуре пленки на

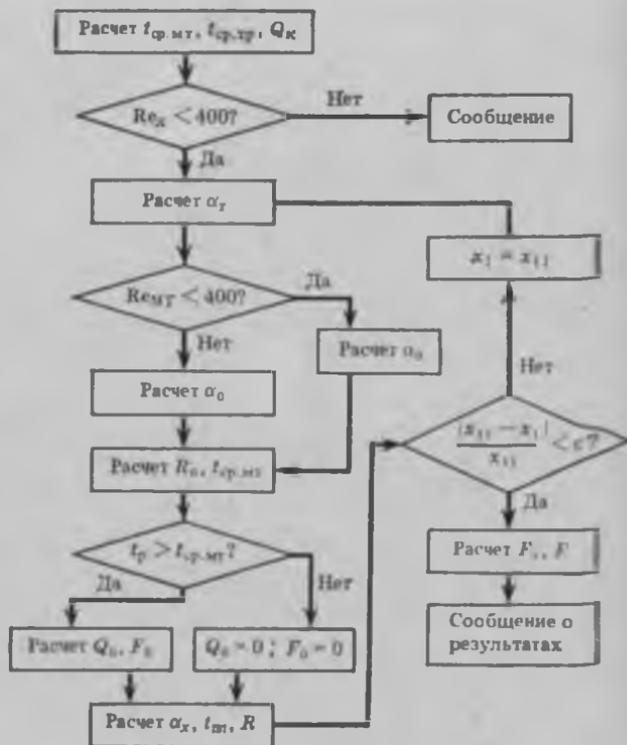


Рис. 7.27. Алгоритм расчета конденсатора

поверхности трубок

$$t_{пл. мТ} = t_{cp. мТ} - \left[(t_{cp. мТ} - t_{cp. тР}) \left(\frac{1}{\alpha_0} \frac{Q_T}{Q} + \frac{1}{\alpha_K} \right) \right] / 2R_K, \quad (7.346)$$

где $t_{cp. мТ}$, $t_{cp. тР}$ — средние температуры потоков в конденсаторе, Q_T — теплота охлаждения остаточного газа.

Алгоритм расчета конденсатора (рис. 7.27) состоит в итеративном уточнении температуры стенки. При этом на каждой итерации контролируется изменение величины $x = (Pr/Pr_{ст})^{0,25}$. Если относительное изменение этого параметра на двух последующих итерациях не превосходит заданной точности, то расчет заканчивается. Помимо этого, на каждой итерации проводится уточнение температуры стенки в межтрубном пространстве.

Расчет поверхности теплообмена кипятыльника. Процесс кипения является настолько сложным, что многие аспекты его еще изучены недостаточно полно. При расчете кипятыльников в

честве рабочего режима аппарата допускается пузырьковый режим кипения жидкости, при котором коэффициент теплоотдачи очень высок и мало зависит от массовой скорости и весового паро-содержания. Основная трудность при расчете заключается в определении величины критической нагрузки $q_{кр}$, отделяющей режим пузырькового кипения от пленочного, при котором за счет образования на теплопередающей поверхности пленки пара происходит резкое уменьшение коэффициента теплоотдачи с увеличением подводимого тепла. Величину $q_{кр}$ используют как верхний предел целесообразных тепловых нагрузок на аппарат.

Алгоритм расчета кипяtilьника предполагает возможность определения поверхности теплообмена как горизонтального, так и вертикального аппаратов при условии, что кипение жидкости может происходить в трубном и межтрубном пространствах. В основе алгоритма лежат те же положения, что и при расчете подогревателя — холодильника. Особенность заключается в определении коэффициентов теплоотдачи.

Обычно нагревание жидкости происходит за счет конденсации насыщенного водяного пара, который подается в аппарат. В этом случае определение коэффициента теплоотдачи при конденсации производится по уравнениям: при конденсации на поверхности вертикальных трубок

$$\alpha_n = 2,04 ((r\rho^3\lambda^3)/(\mu\Delta tH))^{0,25}; \quad (7.347)$$

при конденсации в горизонтальных трубках

$$\alpha_k = 1,28 [(r\rho^3\lambda^3)/(\mu\Delta td)]^{0,5}, \quad (7.348)$$

где r — теплота конденсации; ρ — плотность конденсата; λ — теплопроводность конденсата; μ — динамический коэффициент вязкости конденсата; Δt — разность температур $t_{конд} - t_{ст}$; H — высота трубки; d — диаметр горизонтальной трубки.

Для расчета коэффициента теплоотдачи при кипении используется уравнение [92]

$$\alpha_n = 7,77 \cdot 10^{-2} \left(\frac{\rho_n r}{\rho_n - \rho_n} \right)^{0,033} \left(\frac{\rho_{ж}}{\sigma} \right)^{0,033} \frac{\lambda_{ж}^{0,75} \rho_{ж}^{0,7}}{\rho_{ж}^{0,45} \sigma^{0,12} t_{нас}^{0,37}}, \quad (7.349)$$

где ρ_n — плотность пара; σ — поверхностное натяжение; $t_{нас}$ — температура насыщения.

В выражении (7.349) значение r рассчитывается при температуре конденсации, остальные параметры — при средней температуре пленки конденсата

$$t_{пл} = (t_{ст. конд} + t_{конд})/2. \quad (7.350)$$

Алгоритм расчета основан на решении уравнения

$$f(t_{ст. конд}) = t_{кип} + q \left(\frac{1}{\alpha_n} + \sum R \right) - t_{ст. конд} = 0, \quad (7.351)$$

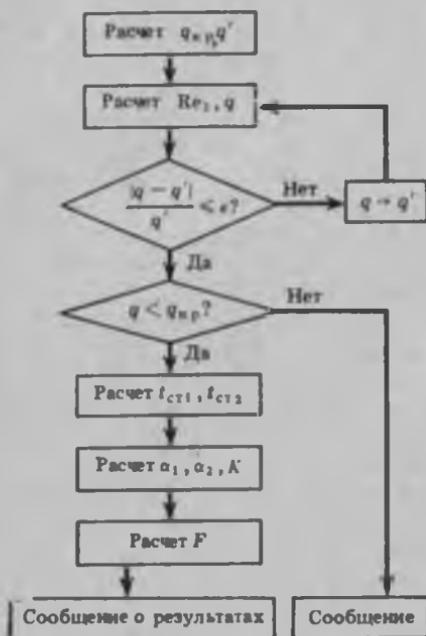


Рис. 7.28. Алгоритм расчета кипятильника

где $t_{кип}$ — температура кипения смеси; $t_{ст.конт}$ — температура стенки со стороны конденсирующегося пара. Значение q вычисляется по соотношению

$$q = \alpha_k (t_k - t_{ст.конт}), \quad (7.352)$$

где t_k — температура конденсации.

Таким образом, уравнение (7.351) содержит только одну неизвестную $t_{ст.конт}$, вычислить которую можно, определив удельную тепловую нагрузку на аппарат и температуру стенки со стороны кипящей жидкости

$$t_{ст.кип} = t_{ст.конт} - \sum Rq. \quad (7.353)$$

Полученная в результате расчета тепловая нагрузка сравнивается с критическим значением этой величины, которая определяется по уравнению

$$q_{кр} = 423 \frac{\lambda_{ж}^{0,4} (\rho_{ж} - \rho_{п})^{0,48} (\rho_{п\Gamma})^{0,26} t_{нас}^{0,32} \sigma^{0,21}}{\rho_{ж}^{0,21} \mu_{ж}^{0,14} C_{ж}^{0,06}}. \quad (7.354)$$

Необходимым условием нормальной работы кипятильника является выполнение неравенства

$$q < q_{кр}. \quad (7.355)$$

Алгоритм расчета кипятильника приведен на рис. 7.28.

Для выбора оптимального аппарата принят экономический критерий, учитывающий капитальные и эксплуатационные затраты. Так как полная экономическая оценка производится при расчете установки, то при оценке аппарата используется частный критерий

$$C = FS_F/T_n + G_{тн}S_{тн}, \quad (7.356)$$

где T_n — нормативный срок окупаемости оборудования; S_F — стоимость единицы площади теплопередающей поверхности аппарата; $S_{тн}$ — стоимость теплоносителя; $G_{тн}$ — расход теплоносителя.

Критерий (7.356) не учитывает расходы на монтаж аппарата, ПИА, трубопроводы, амортизационные отчисления, так как эти величины обычно пропорциональны капитальным и эксплуатационным расходам и при сравнении аппаратов могут не учитываться.

Выбор теплообменных аппаратов, предназначенных для работы в заданных условиях, производится с использованием каталогов, имеющихся в банке данных. Первоначально, исходя из граничных значений коэффициентов теплопередачи для заданного типа аппарата, рассчитываются граничные значения поверхности теплообмена. Затем, начиная с минимального значения поверхности, из каталога выбираются конструктивные данные аппаратов и производится их тепловой расчет. Если в процессе расчета нарушается какое-либо из условий по скоростям или режимам течения жидкости, то происходит переход к соседней по значению поверхности группе аппаратов. Эта процедура повторяется до тех пор, пока не будет выбран теплообменник с относительной точностью по поверхности менее чем $0,2 \text{ м}^2$. Если не удастся достигнуть заданной точности, то необходимо перейти к другому типу теплообменников или проектированию нестандартного оборудования.

7.4. Пакеты прикладных программ для расчета типовых процессов химической технологии

На современном этапе развития метода математического моделирования и системного анализа использование отдельных моделей не характерно для решения задач расчета и проектирования как технологических процессов, так и производств. Даже в простейшем случае математическая модель связана с операционной системой соответствующей ЭВМ и включает, помимо прикладных программ, системные сервисные программы, средства обеспечения диалога, представления входных и выходных данных, информационное обеспечение. Организация взаимодействия элементов пакета производится с помощью управляющей программы чаще всего с произвольной структурой, что позволяет генерировать необходимую последовательность модулей в зависимости от задания. Наличие локальных управляющих программ пакетов повышает эффективность автоматического использования данного пакета и, вообще говоря, упрощает его разработку. Ниже приведены примеры таких пакетов программ, которые в общей системе проектирования могут выступать в качестве подсистем.

7.4.1. Проектирование установок периодической ректификации

Периодическая ректификация занимает важное место в малотоннажных производствах и процессах получения особо чистых веществ, имея преимуществом перед непрерывной то, что для полу-

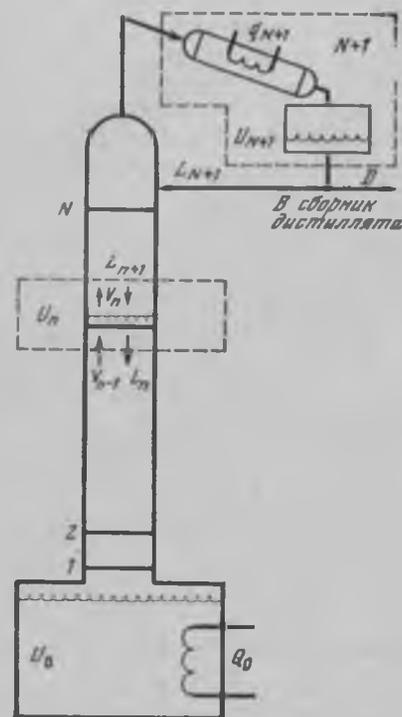


Рис. 7.29. Установка периодической ректификации

чения группы фракций (или компонентов) используется одна установка. Однако несмотря на разработанность математического обеспечения для непрерывной ректификации и общности отдельных составляющих (фазовое равновесие, кинетика массопереноса, гидродинамика потоков), специфические особенности периодического ведения процесса не позволяют использовать его в полной мере. Это связано с тем, что периодический процесс протекает в динамическом режиме и, следовательно, описывается системами дифференциальных уравнений, решение которых значительно сложнее, чем алгебраических (по крайней мере требует больших затрат машинного времени), а также тем, что ряд пара-

метров процесса изменяется по времени (например, отбор фракций, флегмовое число, паровая нагрузка) и для поддержания оптимальных условий эксплуатации необходимо иметь соответствующую стратегию изменения последних. По существу, речь идет о совместном решении задач оптимального проектирования и управления.

Установка периодической ректификации (рис. 7.29) может работать в трех режимах: с отбором дистиллята переменного состава; с отбором дистиллята постоянного состава; с оптимальной стратегией изменения флегмового числа.

При отборе дистиллята переменного состава количество флегмы можно, в общем случае, сохранять постоянным. Однако на практике чаще всего ее сохраняют постоянной на период отбора данной фракции (в пределах заданного интервала температур). При отборе узких фракций флегмовое число обычно повышается.

При отборе дистиллята постоянного состава при исчерпании количества летучего компонента в кубе необходимо величину флегмы непрерывно повышать. В промышленных условиях этот режим из-за отсутствия, в общем случае, стратегии непрерывного изменения флегмы используется редко.

Оптимальная стратегия изменения флегмового числа определяется как задача получения необходимого количества дистиллята заданного состава за минимальное время при известных начальных условиях.

Математическое описание периодической ректификации состоит [94] из уравнений общего материального баланса

$$du_0/dt = L_1 - V_0; \quad (7.357)$$

$$du_i/dt = L_{i+1} + V_{i-1} - L_i - V_i; \quad (7.358)$$

$$du_{N+1}/dt = V_N - L_{N+1} - D, \quad (7.359)$$

уравнений покомпонентного материального баланса

$$\frac{dx_{i0}}{dt} = \frac{1}{u_0} [L_1(x_{i1} - x_{i0}) - V_0(y_{i0} - x_{i0})]; \quad (7.360)$$

$$\frac{dx_{ij}}{dt} = \frac{1}{u_j} [L_{j+1}x_{ij+1} + V_{j-1}y_{ij-1} - L_jx_{ij} - V_jy_{ij}], \quad i = 1, 2, \dots, k,$$

$$j = 1, \dots, N; \quad (7.361)$$

$$\frac{dx_{iN+1}}{dt} = \frac{V_N}{u_{N+1}} (y_{iN} - x_{iN+1}), \quad (7.362)$$

уравнений теплового баланса

$$\frac{d(u_0h_0)}{dt} = L_1h_1 - V_0H_0 + Q_0; \quad (7.363)$$

$$\frac{d(u_ih_i)}{dt} = L_{i+1}h_{i+1} + V_{i-1}H_{i-1} - L_ih_i - V_iH_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (7.364)$$

$$\frac{d(u_{N+1}h_{N+1})}{dt} = V_NH_N - L_{N+1}h_{N+1} - Dh_{N+1} - q_{N+1} \quad (7.365)$$

и уравнений для расчета равновесных составов пара и жидкости (4.22), уравнения для расчета состава покидающего тарелку пара (4.59).

Основная трудность расчета состоит в «жесткости» системы уравнений (7.357) — (7.365), обусловленной различной величиной собственных значений матрицы коэффициентов. Поскольку размерность системы определяется числом тарелок в колонне и числом компонентов разделяемой смеси, которые могут быть достаточно большими, то от эффективности метода решения системы дифференциальных уравнений зависит и эффективность всего алгоритма проектирования установки.

В общем случае система уравнений материального баланса (7.360) — (7.362) для расчета составов пара и жидкости является нелинейной. Однако последняя может быть линеаризована на

каждой итерации заменой $y_{ij} = K_{ij}x_{ij}$, где K_{ij} определяются на предыдущих шагах интегрирования.

Расчет составов пара и жидкости. Для решения линеаризованной системы уравнений материального баланса можно воспользоваться принципом квазистационарности производных [95], суть которого состоит в разбиении по времени решения жесткой системы на два неравных интервала: начальный и конечный. Длительность начального интервала значительно меньше длительности основного. Поведение системы на начальном интервале определяется всеми входящими в систему уравнениями, а на основном — частью уравнений, имеющих медленные составляющие решения. Остальные уравнения преобразуются в алгебраическую форму в соответствии с принципом квазистационарности, т. е. приравниванием нулю s -й производной

$$(dx/dt)^s = 0, \quad s = 0, 1, 2, \dots \quad (7.366)$$

Случай $s = 0$ соответствует расчету ректификации на основном интервале без учета удерживающей способности.

Для периодической ректификации уравнения (7.357) и (7.360) дают медленные составляющие решения, а (7.361) и (7.362) — быстрые. Таким образом, на основном интервале последние два уравнения заменяются алгебраическими в соответствии с принципом квазистационарности и решению подлежит система вида

$$\frac{du_0}{dt} = L_1 - V_0; \quad (7.367)$$

$$\frac{dX_0}{dt} = \frac{1}{u_0} [L_1(X_1 - X_0) - V_0(Y_0 - X_0)]; \quad (7.368)$$

$$A'X + B' = 0, \quad (7.369)$$

т. е. необходимо на каждом шаге интегрирования решать систему (7.369). При $s = 1$ определение коэффициентов a_{ij} и b'_j проводится как это демонстрируется на примере уравнения (7.361):

$$\begin{aligned} \frac{dX_1}{dt} &= a_{10} \frac{dX_0}{dt} + a_{11} \frac{dX_1}{dt} + a_{12} \frac{dX_2}{dt} = \\ &= a_{10} \frac{1}{u_0} [\dots] + a_{11} \frac{1}{u_1} [\dots] + a_{12} \frac{1}{u_2} [\dots] = \\ &= a_{11} X_1 + a_{12} X_2 + a_{13} X_3 + b'_1 = 0. \end{aligned}$$

Здесь a_{ij} — коэффициенты исходной линеаризованной системы уравнений баланса, определяемые по известным с предыдущего шага интегрирования коэффициентам фазового равновесия; X — вектор.

Обычно при расчетах s принимают равным 0, 1, 2, исходя из точности решения и жесткости системы. За величину начального интервала выбирается такое значение t , начиная с которого

построение алгебраической системы будет иметь смысл по точности воспроизведения реальных условий.

Для интегрирования системы уравнений на начальном интервале и уравнений (7.367), (7.368) на основном оказывается эффективной одношаговая неявная схема (7.10), где W — диагональная матрица корректирующих параметров, элементы которой равны

$$W = \frac{1}{z_i} - \frac{1}{\exp(z_i) - 1}. \quad (7.370)$$

Если записать систему дифференциальных уравнений (7.360) — (7.362) в матричном виде как

$$\dot{X} = dX/dt = AX + B, \quad (7.371)$$

то формулу (7.10) можно записать в виде

$$X^k = (I - P \cdot A)^{-1} (W X^{k-1} + X^{k-1} + P \cdot B), \quad (7.372)$$

где P — диагональная матрица, элементы которой равны

$$p_i = h(1 - W_i). \quad (7.373)$$

Таким образом, интегрирование системы линейных дифференциальных уравнений в соответствии с формулой (7.10) сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений, матрица коэффициентов которой имеет трехдиагональную структуру, поэтому для ее решения удобно воспользоваться методом прогонки, эффективным с точки зрения быстродействия и занимаемой памяти [96, 97].

Величина z_i определяет величину шага интегрирования, при котором сохраняется заданная точность решения. Для ее оценки предложено соотношение

$$z_i = \text{const} = h |\lambda_{\max}| / 2; \quad (7.374)$$

$$\left(\frac{L_j + K_{ij}V_j}{u_j} \right) \leq |\lambda_{\max}| \leq 2 \left(\frac{L_j + K_{ij}V_j}{u_j} \right),$$

где λ_{\max} — максимальное по модулю собственное значение матрицы, A ; h — величина шага интегрирования. Однако при расчете многокомпонентной ректификации параметры z_i будут различаться для отдельных фракций. Согласно принципу квази-стационарности переход от полной системы к нежесткой меньшей размерности происходит скачками, каждый из которых характеризуется группой собственных значений $\lambda_j^{(i)}$ ($i = 1, 2, \dots, k$; $j = 1, 2, \dots, N$), среди которой на данный момент времени можно определить

$$|\lambda_{\max}| = \max_i |\lambda_j^{(i)}|.$$

За счет уменьшения $|\lambda_{\max}|$ при заданной точности становится возможным увеличение h . Можно предположить, что величины h и $|\lambda_{\max}|$ связаны обратной зависимостью, а их произведение постоянно на интервале интегрирования. Практическими расчетами показано [96, 97], что удовлетворительные результаты достигаются при сохранении z постоянным на основном участке интегрирования.

Для определения величины z_i в зависимости от точности решения можно воспользоваться формулой

$$z_i = h [(L_j + K_{ij}V_j)/u_j]. \quad (7.375)$$

Опыт показывает, что в конце начального интервала величина шага интегрирования стабилизируется и, следовательно, $z = \text{const}$.

Расчет потоков пара и жидкости. Определение потоков по высоте колонны производится решением системы уравнений теплового (7.363) — (7.365) и материального (7.357) — (7.359) балансов итерационно от тарелки к тарелке по формулам

$$V_N = L_{N+1} + D; \quad (7.376)$$

$$q_{N+1}V_N(H_N - h_{N+1}) - U_{N+1}\delta_t h_{N+1};$$

$$V_{j-1} = \frac{1}{H_j - h_j} [V_j(H_j - h_j) - L_{j+1}(h_{j+1} - h_j) + u_j\delta_t h_j];$$

$$L_j = L_{j+1} + V_{j-1} - V_j;$$

$$Q_0 = V_0(H_0 - h_0) - L_1(h_1 - h_0) + u_0\delta_t h_0,$$

где $\delta_t h$ — численная аппроксимация производной dh/dt . Признаком окончания является равенство рассчитанной и заданной величины тепловой нагрузки на куб колонны с заданной точностью.

При постоянстве потоков пара и жидкости по высоте колонны количество жидкости при заданном количестве пара определяется как

$$L = V \cdot R / (R + 1). \quad (7.377)$$

Схема расчета колонны периодической ректификации при отборе с постоянной флегмой и с постоянным составом дистиллята на основе рассмотренных алгоритмов приведена на рис. 7.30.

Оптимальное управление периодической ректификацией. Эта задача определяется как получение необходимого количества дистиллята за минимальное время при известных начальных условиях и относится к проблеме о быстродействии, эффективно решаемой с позиций принципа максимума. Основная трудность при этом состоит в многомерности задачи, заключающейся в том, что с ростом числа компонентов смеси растет и размерность сопряженной системы. Кроме того, жесткость системы дифференциальных уравнений приводит к необходимости выбора спе-

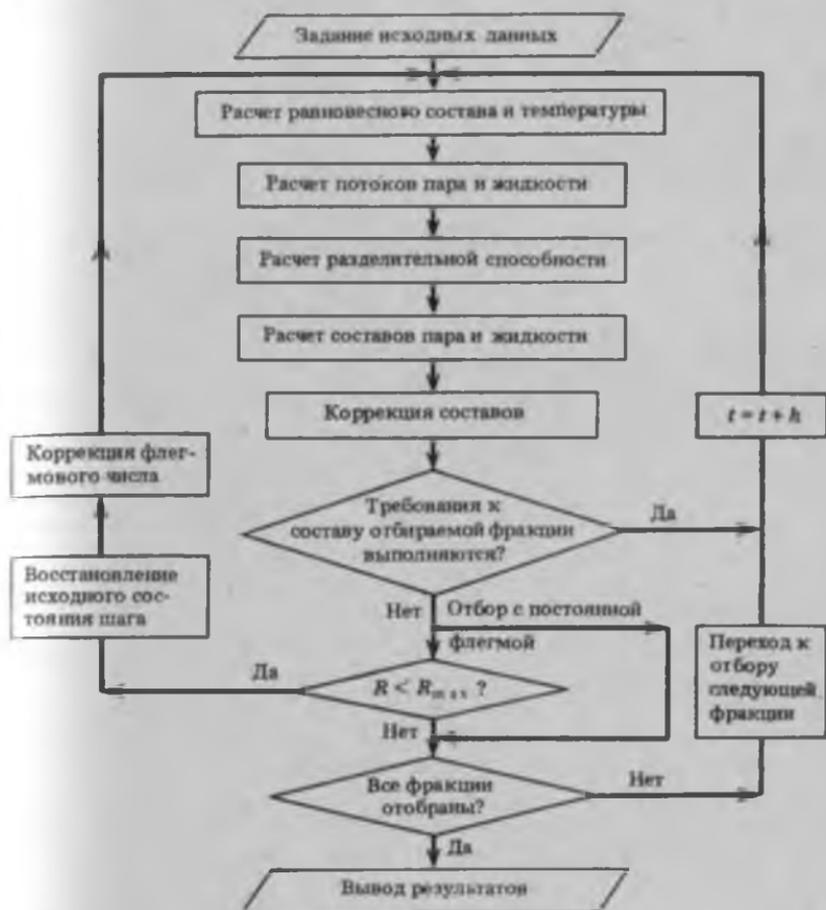


Рис. 7.30. Алгоритм расчета периодической ректификации при отборе дистиллята с постоянными составом и флегмой

специальных методов решения, обеспечивающих быстродействие и компактность. При использовании в качестве управляющего воздействия флегмового числа размерность задачи определения оптимального уравнения по принципу максимума равна $M = (N + 2)(k - 1)$. Однако благодаря применению принципа квазистационарности как метода решения системы дифференциальных уравнений размерность задачи снижается до $(k - 1)$, что позволяет говорить о практической возможности расчета с учетом удерживающей способности [98].

Сопряженная система по принципу максимума имеет вид

$$\frac{dp_k}{dt} = - \sum_{j=0}^M p_j \frac{df_j}{dz_k}, \quad k = 0, 1, \dots, M \quad (7.378)$$

и функция Гамильтона

$$G(Z, P, R) = \sum_{j=0}^M p_j f_j \quad (7.379)$$

где Z — обобщенная переменная U_0, X_0, X_t, X_{t+1} ; P — сопряженная векторная функция; f — правые части уравнений (7.367) — (7.369).

Процедура решения состоит в том, чтобы оценить сопряженную функцию $P(t)$ в момент времени t и проинтегрировать систему уравнений (7.367) — (7.369) и (7.378) по времени, выбирая на каждом шаге интегрирования флегмовое число таким образом, чтобы выполнялось условие

$$G(Z, P, R_{opt}) = \min_R G(Z, P, R).$$

Решение задачи о быстродействии существенно упрощается при наличии аналитических выражений для сопряженных функций. Применительно к бинарной ректификации при допущении постоянства удерживающей способности можно записать аналитические выражения для вспомогательных функций $P(t)$, однако при переходе к многокомпонентным смесям целесообразнее воспользоваться численным приближением, имея в виду при этом, что задача в общем виде не может быть решена аналитически. Поэтому процедура расчета оптимального управления на основном интервале для каждой целевой функции сведена к определению начального значения $P(t)$ и интегрированию системы уравнений (7.367), (7.371) и (7.378).

Исходя из физических представлений о процессе можно принять, что оптимальный режим работы колонны должен начинаться с режима полного орошения ($R = \infty$), так как колонна в начальный период должна выйти на режим отбора продукта заданного качества. Отсюда длительность режима полного орошения не меньше величины начального интервала. Поскольку начальный интервал составляет небольшую часть времени разделения, то такое предположение может лишь незначительно увеличить общее время разделения. Таким образом, оптимальное управление на начальном интервале можно определить без использования принципа максимума.

На основном интервале могут быть участки быстрого изменения концентраций, для которых принцип квазистационарности не выполняется. Обычно это участки отбора целевых и промежуточных фракций. После отбора последней фракции необходимо осуществить слив содержимого колонны при низком флегмовом числе. Расположение таких участков можно определить заранее.

Для снижения объема вычислений расчет оптимального управления на основном интервале ведется по полной системе уравнений (7.357), (7.360) — (7.362), (7.378), где сопряженная система

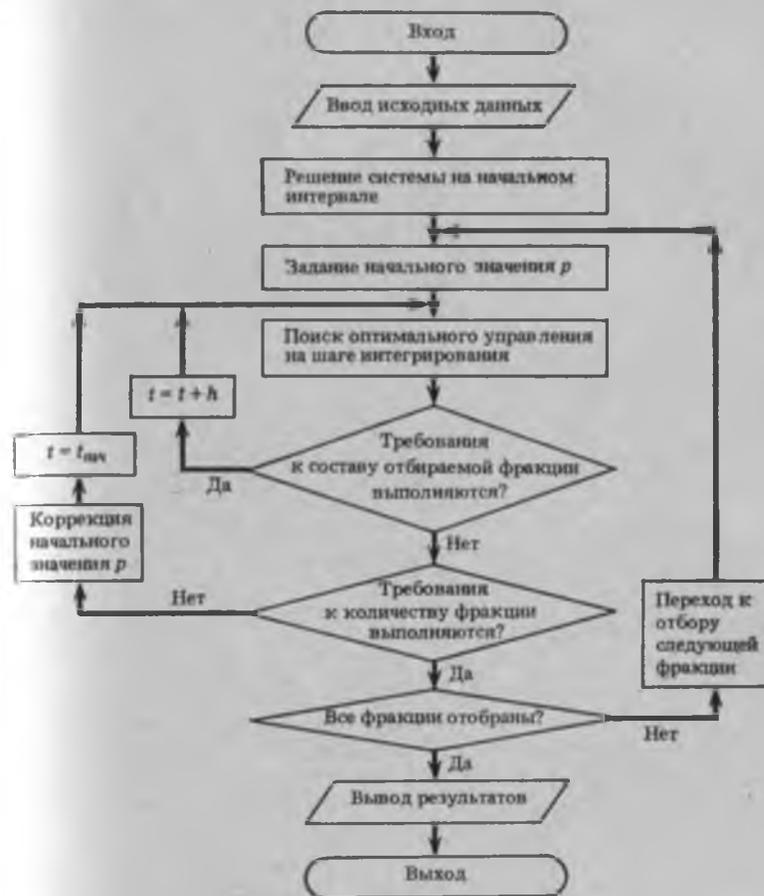


Рис. 7.31. Алгоритм расчета оптимального управления с учетом удерживающей способности

(7.378) определена для уравнений (7.367) и (7.368). Проверка выполнения принципа квазистационарности не производится, а на заранее известных участках быстрого изменения концентраций расчеты ведутся при $R = \text{const}$ без использования принципа максимума. Так как доля таких участков невелика, то ухудшение характеристик процесса будет незначительным. При полном отборе наиболее летучих компонентов размерность системы уменьшается. Алгоритм расчета оптимального управления приведен на рис. 7.31. Практическими расчетами было показано, что гамильтониан является унимодальной функцией флегмового числа, поэтому для поиска экстремума на шаге интегрирования исполь-

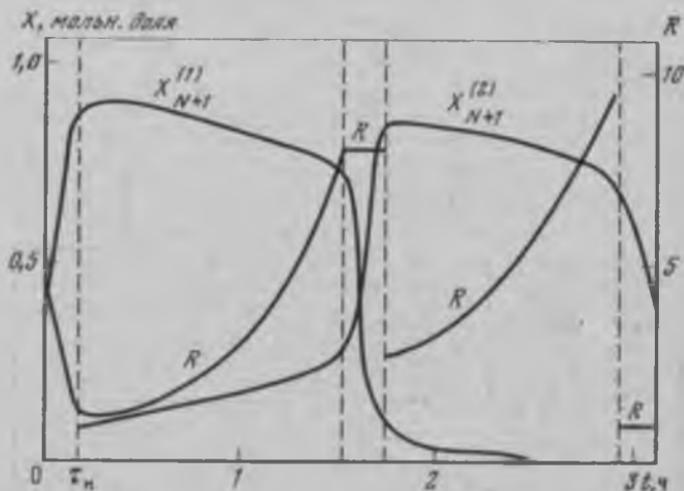


Рис. 7.32. Изменение концентрации в дефлегматоре и флегмового числа при расчете колонны с учетом удерживающей способности

зован алгоритм локального поиска с использованием чисел Фибоначчи.

На рис. 7.32 приведены результаты расчета колонны периодической ректификации при разделении бинарной смеси состава 0,4 и 0,6 с коэффициентами относительной летучести 2,25 и 1. Начальная загрузка колонны 130 кмоль, паровой поток 75 кмоль/ч, число тарелок — 6. Требования к качеству верхнего продукта 0,8 и 0,85 соответственно. При ведении процесса в режиме оптимального изменения флегмового числа длительность его сокращается с 4,3 до 3,1 ч.

Оптимальное проектирование. Задача проектирования формулируется как задача многокритериальной оптимизации. При этом в качестве варьируемых параметров используются: число ступеней разделения; флегмовые числа при отборе отдельных фракций (отбор с постоянной флегмой); начальные значения сопряженных переменных в задаче оптимального управления. В качестве критериев используются такие характеристики процесса, как степень извлечения по каждому компоненту; качество продуктов разделения (обычно задано); производительность по целевым фракциям; экономические характеристики (приведенные затраты). Так как критерии противоречивы, то решение находится из набора решений на компромиссной гиперплоскости, а выбор наилучшего производится в диалоговом режиме, реализующем систематический просмотр пространства параметров (ЛП-поиск [99, 100]).

Проектирование с использованием нескольких критериев обычно носит характер эвристического итерационного поиска: проектировщик, рассматривая различные проекты, оценивает результаты, уточняет постановку задачи и т. д. При этом нередко меняются взгляды на значимость отдельных критериев, ограничений.

Решению задачи проектирования предшествует формирование некоторого подмножества D точек A_i пространства параметров Π , удовлетворяющих ограничениям

$$\alpha_i^* \leq \alpha_i \leq \alpha_i^{**}, \quad i = 1, 2, \dots, k, \quad (7.38)$$

характеризующим пределы изменения параметров процесса и задаваемых обычно пользователем; функциональным ограничениям

$$c_j^* \leq J_j(A) \leq c_j^{**}, \quad j = 1, 2, \dots, n, \quad (7.331)$$

накладываемым на параметры процесса и являющимся некоторыми функциями параметров; ограничениям, накладываемым критериями оптимальности:

$$\Phi_l^* \leq \Phi_l(A), \quad l = 1, 2, \dots, q. \quad (7.382)$$

Если подмножество D , определяющее область допустимых решений, непусто, то решение задачи проектирования существует.

На первом этапе проектирования последовательно выбирается N точек, равномерно расположенных в пространстве Π , для каждой из которых проводится расчет и проверяются функциональные ограничения. При этом отдельные функциональные ограничения могут формироваться на основе анализа результатов расчета. Для каждой из точек, включенных в пространство, вычисляются значения критериев и составляются таблицы испытаний, в которых значения $\Phi_1(A), \dots, \Phi_q(A)$ располагаются в порядке возрастания (убывания) и указаны номера соответствующих пробных точек.

На основании этих данных пользователь может назначить ограничение для каждого критерия Φ_j^* , но таким образом, чтобы подмножество D не оказалось пустым. Если окажется (в результате последующей проверки), что D пусто, то необходимо либо потребовать уступок на величины Φ_j^* , либо увеличить количество пробных точек и провести последующие испытания с большим объемом данных. На последующем этапе можно попытаться улучшить решение за счет ослабления каких-либо ограничений путем оценки соответствующих ресурсов. Нетрудно заметить, что такая стратегия оптимального проектирования эффективна лишь при наличии диалога между пользователем и пакетом программ.

Структура пакета программ. Модули пакета программ для расчета и проектирования периодической ректификации по функциональному назначению разделены на отдельные группы

(блоки), а именно:

Имя блока	Объем занимаемой памяти, кбайт
Управление ходом расчетов	20
Моделирование	80
Оптимальное проектирование	20
Ввод и обработка исходной информации	40
Вывод информации	20

При моделировании допускается различное математическое описание отдельных явлений процесса. Например, расчет фазового равновесия по коэффициентам относительной летучести или с учетом неидеальности жидкой и паровой фаз, расчет по теоретическим тарелкам или с учетом кинетики массопередачи, с учетом или без учета удерживающей способности колонны и т. д. Формирование конкретного пакета программ производится средствами ОС/ЕС на этапе редактирования. Диалоговый режим поддерживается системой разделения времени на основе языка директив.

7.4.2. Расчет технологических схем разделения многокомпонентных смесей

Одним из подходов к созданию математических моделей, универсальных по классам аппаратов (ректификация, абсорбция, экстракция, азеотропно-экстрактивная ректификация), является метод декомпозиции, заключающийся в представлении общей модели как совокупности элементарных частей [88, 101]. Декомпозиция технологической схемы, включающей различные массообменные аппараты, состоит в разделении ее на массообменные секции и вспомогательное оборудование и выделении из общей системы уравнений математического описания отдельных частей, соответствующих этим секциям с учетом взаимосвязей между ними. Под массообменной секцией понимается физическая последовательность отдельных массообменных элементов, взаимосвязанных друг с другом и не имеющих промежуточных входов и выходов массы и тепла — все входы и выходы сосредоточены на ее концах. При таком определении количество секций зависит от количества и расположения вводов питания и боковых отборов потоков, а различия между ними заключаются, во-первых, в моделях фазового равновесия и массопередачи на ступенях разделения и, во-вторых, в подсоединяемом к секциям вспомогательном оборудовании: для ректификационных колонн это кипятыльник и дефлегматор, для экстракционных колонн — декантаторы и т. д.

Разнородность массообменных секций, обусловленная различием моделей фазового равновесия и массопередачи на ступенях,

легко поддается формализации: входом любой модели ступени является вектор составов одной фазы, а выходом — вектор составов другой фазы

$$Y = F(X, P), \quad (7.383)$$

где P — вектор параметров модели. В том случае, когда на ступени разделения взаимодействуют несколько фаз (например, три фазы при разделении системы с расслаиванием), то их можно объединить в две группы, например, по агрегатному состоянию

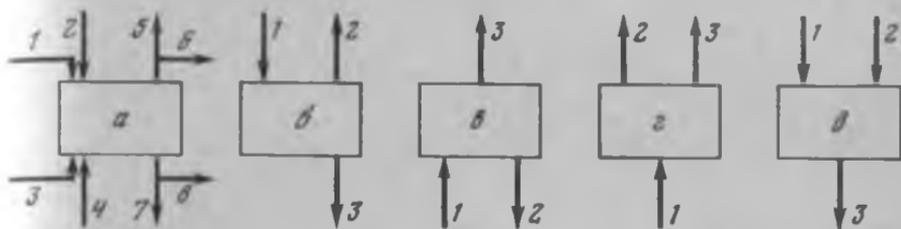


Рис. 7.33. Нумерация потоков в типовых элементах схемы

a — массообменная секция; $б$ — кипятильник; $в$ — дефлегматор; $г$ — декантатор; $д$ — смеситель

и под X и Y подразумевать не составы фаз, а брутто-составы этих групп.

Следовательно, любую технологическую схему разделения можно описать, имея в распоряжении набор типовых элементов, включающий модели ступени разделения, секций и вспомогательного оборудования (табл. 7.8). Если же на ступени разделения осуществляется подвод или отбор тепла, то элемент «массообменная секция» вырождается в одну ступень разделения в соответствии с определением секции. Математическим описанием будет описание всех входящих в схему элементов.

Язык описания технологической схемы. Для описания топологии схемы используется уплотненная матрица связей I , состоящая из двух строк и N_T столбцов, где N_T — количество промежуточных, соединяющих элементы, связей. Связанными являются потоки с номерами I_{1j} и I_{2j} , причем всегда соблюдается условие $I_{1j} < I_{2j}$. Нумерация потоков производится в порядке возрастания номеров элементов схемы разделения, а для каждого элемента — в фиксированном порядке: сначала все входные потоки, а затем все выходные (рис. 7.33). Такой порядок нумерации определяется матрицей входов-выходов D , имеющей две строки и M столбцов, где M — количество различных типов элементов в схеме. Элемент матрицы D_{1j} равен суммарному количеству входных и выходных потоков в технологическом элементе j -го типа, а D_{2j} — количеству входных потоков этого же элемента.

Таблица 7.8

Схема элемента	Уравнения материального Саланса	Уравнения теплового Саланса
<p>1. Массообменная секция</p>	$FV y_{Fj} + V_1 v_{1j} + L_2 x_{2j} - V_2 v_{2j} - (L_1 + SL) x_{1j} = 0; \quad (j = \overline{1, k})$ $V_i v_{ij} + L_{i+1} x_{i+1, j} - V_{i+1} v_{i+1, j} - L_i x_{ij} = 0; \quad (i = \overline{2, s-1}; j = \overline{1, k})$ $F x_{Fj} + L_{s+1} x_{s+1, j} + V_2 v_{2j} - L_s x_{sj} - (SV + V_{s+1}) v_{s+1, j} = 0; \quad (j = \overline{1, k})$	$FV H_F + V_1 H_1 + L_2 h_2 - V_2 H_2 - (L_1 + SL) h_1 = 0;$ $V_i H_i - L_{i+1} h_{i+1} - V_{i+1} H_{i+1} - L_i h_i = 0 \quad (i = \overline{2, s-1});$ $F_L h_F + L_{s+1} h_{s+1} + V_2 H_2 - L_s h_s - (SV + V_{s+1}) H_{s+1} = 0$
<p>2. Кипятильник</p>	$L x_j - V y_j - W x_W = 0 \quad (j = \overline{1, k})$	$L h - V H - W h_W = 0$
<p>3. Дефлегматор</p>	$V y_j - L x_j - D x_{Dj} = 0 \quad (j = \overline{1, k})$	$V H - L h - D h_D = 0$

Таблица 7.8 (окончание)

Схема элемента	Уравнения материального Саланса	Уравнения теплового Саланса
<p>4. Декантатор</p>	$L x_j - R x_{Rj} - E x_{Ej} = 0 \quad (j = \overline{1, k})$	$L h - R h_R - E h_E = 0$
<p>5. Смеситель</p>	$L_1 x_{1j} + L_2 x_{2j} - L_3 x_{3j} = 0 \quad (j = \overline{1, k})$	$L_1 h_1 + L_2 h_2 - L_3 h_3 = 0$

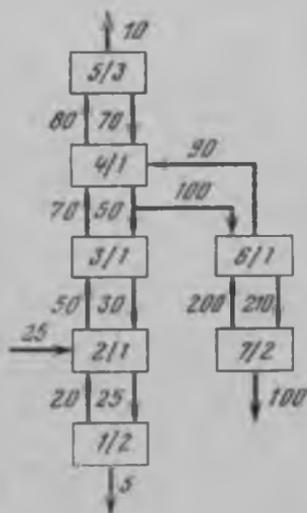


Рис. 7.34. Технологическая схема разделения трехкомпонентной смеси (числитель — порядковый номер элемента; знаменатель — тип элемента; остальные числа — метки потоков)

Кроме матриц D и I , для полного описания технологической схемы используется матрица E , имеющая N строк и N_E столбцов, где N_E — общее количество элементов в схеме. E_{1j} характеризует тип элемента схемы (1 — секция, 2 — кипятильник и т. д.), E_{2j} — задает количество ступеней разделения в j -м элементе схемы; E_{3j} фиксирует номер унифицированного блока расчета фазового равновесия (например, 1 — жидкость—жидкость, 2 — жидкость—жидкость—пар и т. д.).

Для облегчения формирования матриц связей входов—выходов и элементов используется специальный язык описания и соответствующий транслятор. В основе языка описаний (ЯО) используется синтаксис языка макроассемблера

[метка] код оператора [операнды],

где квадратные скобки указывают на обязательность элемента

В ЯО отдельным частям операторов придан следующий смысл: метка служит только для именования оператора; код оператора задает тип отдельного элемента схемы, например: SECTION — секция, BOILER — кипятильник и т. д.; операнды являются ключевыми, т. е. записываются в виде

символ = значение

и служат для помечания потоков, относящихся к элементу, заданному кодом оператора. Метки потоков произвольны и служат для формирования матрицы связей — два связанных между собой потока должны быть помечены одной и той же меткой.

Кроме указанных, ЯО содержит три оператора, выполняющих сервисные функции: оператор комментария, оператор проверки корректности описания и оператор конца описания. Оператор проверки корректности описания задает количество входных и (или) выходных потоков в схеме. Это число может быть сравнено с величиной, подсчитанной автоматически после анализа операторов описания. Критические форматы операторов ЯО приведены в табл. 7.9.

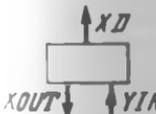
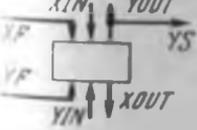
В качестве примера ниже представлен порядок задания исходной информации для схемы на рис. 7.34.

Таблица 7.9

START

BOILER $XIN = 25, YOUT = 20, XOUT = 5$ SECTION $YIN = 20, XOUT = 25, XIN = 30,$
 $YOUT = 50, XF = 25$ SECTION $XOUT = 30, YIN = 50, XIN = 50, YOUT = 70$ SECTION $XOUT = 50, YIN = 60, XIN = 70,$
 $YOUT = 80, YF = 90, XS = 100$ DEFLEG $YIN = 80, XOUT = 70, XD = 10$ SECTION $XIN = 100, YOUT = 90, YIN = 200, XOUT = 210$ BOILER $YOUT = 200, XIN = 210, XOUT = 400$

END

Элемент схемы	Код оператора	Операнд
	BOILER	$XIN = n, XOUT = N, YOUT = n$
	DEFLEG	$YIN = n, XD = n, XOUT = n$
	SECTION	$XIN = n, YIN = n, XOUT = n$ $YOUT = n [, XF = n] [, YF = n]$ $[XS = n] [, YS = n]$
	DECANT	$XIN = n, XR = n, XE = n$
	MIXER	$XIN = n, XIN1 = n, XOUT = n$
CHECK END		INPUT = m[, output = l]

Математическое описание и алгоритм решения системы уравнений баланса. В качестве математического описания элементов схемы используются уравнения (табл. 7.9), записанные для стационарных условий

$$u_i \frac{dx_{ij}}{dt} = M_{ij \text{ вх}} - M_{ij \text{ вых}}, \quad i = 1, 2, \dots, s, \quad j = 1, 2, \dots, k; \quad (7.384)$$

$$h_i \frac{dL_i}{dt} = Q_{i \text{ вх}} - Q_{i \text{ вых}}, \quad (7.385)$$

где M и Q — входные и выходные материальные и тепловые потоки.

В связи с тем, что при расчете стационарных режимов работы технологических схем точное решение динамической модели не является необходимым, целесообразно при интегрировании системы дифференциальных уравнений использовать различные временные шаги интегрирования для каждой переменной, что в случае применения метода Эйлера запишется как

$$x_{ij}^{(n+1)} = x_{ij}^{(n)} + \frac{\Delta t}{u_i} (M_{ij \text{ вх}}^{(n)} - M_{ij \text{ вых}}^{(n)}), \quad (7.386)$$

где фактор релаксации $\mu_{ij} = \Delta t / u_i$ определяется в соответствии с формулами (7.292), (7.293).

Релаксационный алгоритм расчета технологической схемы с учетом декомпозированного представления последней состоит из следующих этапов.

1. Рассчитываются новые значения концентраций на i -й ступени разделения по формуле (7.386).

2. Если новое значение не имеет физического смысла ($0 \leq x < 1$), то следует уменьшить шаг интегрирования или увеличить оценку удерживающей способности, что достигается путем пересчета величины g_{ij} в формуле (7.292)

$$g_{ij}^{(n)} = \sum_l M_{il \text{ вых}}^{(n)}$$

3. Проводится нормировка концентраций x_{ij}

4. Определяется состав другой фазы по уравнению (7.383).

5. Пункты 1—4 повторяются для всех ступеней секции ($i = 1, 2, \dots$).

6. Производится пересылка состояний выходных потоков рассчитанной секции в связанные с ними входные потоки других элементов схемы.

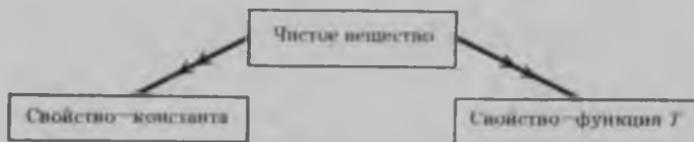
7. Переход к расчету следующего элемента схемы с п. 1.

8. Если просмотрены все элементы схемы, то проверяется условие на выполнение балансовых соотношений схемы в целом, иначе расчеты повторяются сначала.

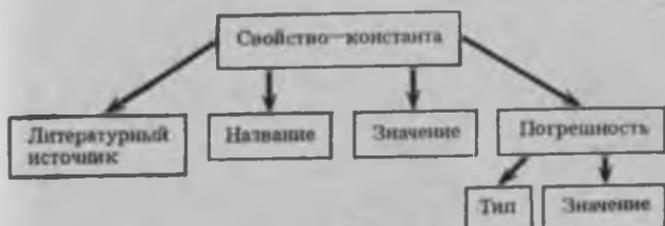
систем помимо общепринятых названий и химических формул. При формировании баз данных принято для каждого компонента использовать до трех названий.

Физико-химические свойства многокомпонентных смесей, зависящие от температуры, давления, состава, и параметры бинарного взаимодействия компонентов обладают той характерной особенностью, что их количество при небольшом увеличении числа чистых компонентов быстро возрастает до больших объемов. Вследствие этого для хранения таких данных необходимо выбирать формы, позволяющие получить характеристики произвольной многокомпонентной смеси из составляющих для смесей возможно меньшей размерности, обладающей большей степенью общности. Исходя из этого принято целесообразным хранить физико-химические свойства многокомпонентных смесей, а рассчитывать их с достаточной степенью точности по известным методикам на основе свойств чистых компонентов. Что касается параметров равновесия в бинарных системах, то для каждой пары компонентов хранятся только коэффициенты (два или три в зависимости от модели описания неидеальности жидкой фазы). Тем не менее разнообразие моделей описания фазового равновесия и их полуэмпирический характер часто не позволяют остановиться на какой-либо одной модели, вследствие чего наряду с коэффициентами предусмотрено хранение и экспериментальных табличных данных по фазовому равновесию в бинарных смесях в специальной базе на внешнем носителе типа магнитной ленты.

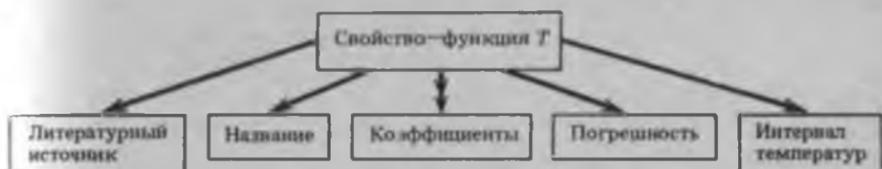
Ранее отмечалось (см. гл. 5), что физико-химические свойства чистых веществ делятся на две группы: свойства — константы и свойства, зависящие от температуры и давления. При допущении, что все переменные свойства определяются для стандартного давления (например, атмосферного), определяющим фактором становится температура. Если обозначить одинарной стрелкой отношение «один к одному», а двойной — «один ко многим», то эту структуру можно отобразить следующим образом:



Свойство-константа определяется названием и значением, для оценки точности существенна его погрешность, а для достоверности — ссылка на литературный источник. Погрешность, в свою очередь, определяется типом (абсолютная или относительная) и значением. Тогда информационные связи между отдельными элементами предметной области можно определить как

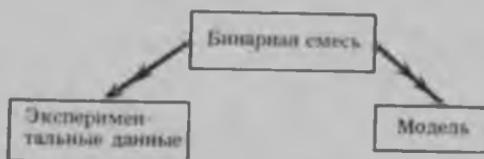


Свойство, зависящее от температуры, описывается названием и коэффициентами аппроксимирующей зависимости. Так же как и для свойства — константы, существенными являются погрешность и ссылка на литературный источник. Кроме того, аппроксимация характеризуется интервалом температур, на котором она работает:

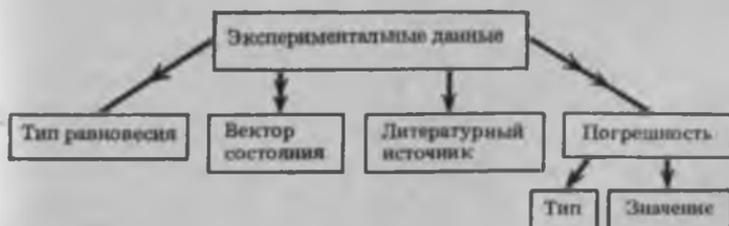


В свою очередь, интервал определения аппроксимации представляет собой нижнюю и верхнюю границы температурного интервала.

Каждая бинарная смесь описывается двумя видами информации — экспериментальными данными по фазовому равновесию и параметрами моделей:



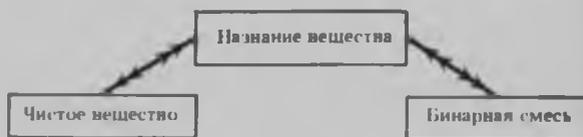
Экспериментальные данные по фазовому равновесию определяют тип данных ($X - Y - P - T$; $X - Y - T$, P и т. д.) и набором векторов состояний бинарной смеси; для повышения надежности данных также необходима ссылка на литературный источник и погрешность данных:



Модель фазового равновесия характеризуется названием, которое одновременно может определять и тип фазового равновесия, вектором параметров модели, набором погрешностей и интервалов определения для каждого параметра состояния системы и ссылкой на литературный источник:

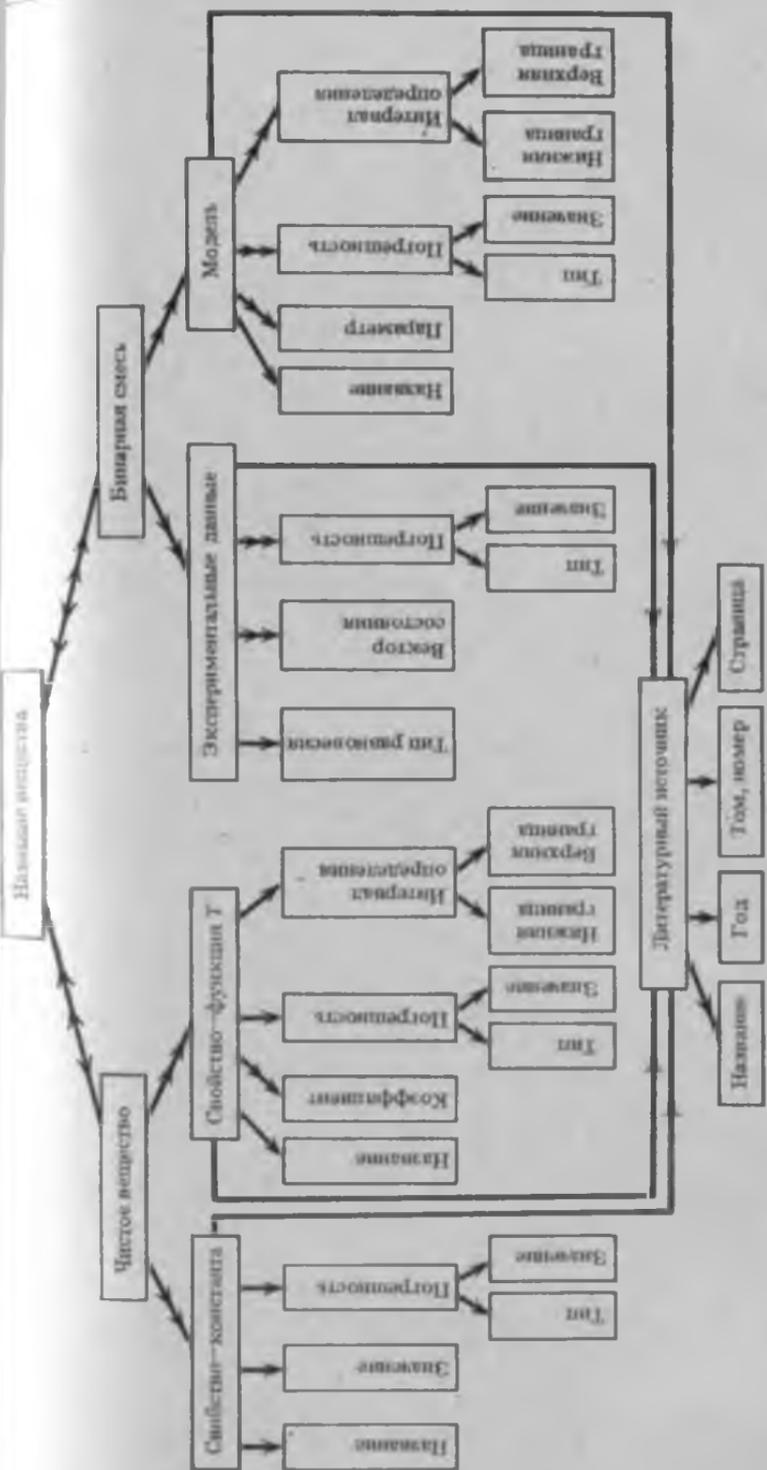


На верхнем уровне структуры информационной модели чистое вещество, бинарная смесь и название вещества относятся между собой следующим образом: одному названию соответствует одно вещество, одному веществу соответствует несколько названий, паре названий разных веществ соответствует одна бинарная смесь, одной бинарной смеси может соответствовать несколько пар названий:



Во всех фрагментах тип «Литературный источник» является одним и тем же типом данных и поэтому должен быть выделен из всех содержащих его фрагментов. Результирующая структура информационной модели предметной области изображена на рис. 7.35.

Для полноты описания информационной модели необходимо определить отображение элементов структуры на память ЭВМ, т. е. указать тип каждого данного, при этом собственным типом могут обладать только конечные (висячие) вершины графа структуры. При анализе таких вершин можно установить, что они делятся на две группы: качественные, например названия, и количественные, например значение, свойства. Качественную информацию, выражаемую словами или символами, целесообразно хранить в символьном виде; количественную — в числовом внутреннем представлении. Длина символьного представления качественной информации определяется, во-первых, из соображений экономии памяти ЭВМ и, во-вторых, из соображений максимальной полноты хранимой информации. Так, для литературного источника отводится 120 байт, названия вещества — 50 байт, названия свойства — константы — 3 байта и т. д. Длина числового представ-



Ис. 7.35. Структура информационной модели предметной области «Физико-химические свойства»

ления количественной информации обычно определяется типом конкретной ЭВМ. Для ЕС ЭВМ — слово или двойное слово.

Аппроксимация свойств-зависимостей производилась полиномами не выше четвертой степени, за исключением давления паров чистого компонента, плотности пара и вязкости жидкости, для которых использовалось уравнение Рейделя

$$y = \exp(A_1 + A_2/T + A_3T + A_4 \ln T).$$

Обработка данных по парожидкостному равновесию. Расчет парожидкостного равновесия включает в себя две взаимосвязанные задачи: определение составов фаз по известным параметрам модели (прямая задача) и определение параметров модели по экспериментальным равновесным данным (обратная задача). Кроме того, к алгоритмам обработки равновесных данных следует отнести методики предварительного контроля равновесных данных, в частности алгоритмы проверки термодинамической совместимости.

Решение прямой задачи расчета равновесия состоит в поиске корня уравнения (4.22), записанного в виде

$$f(T) = \sum_{i=1}^k \gamma_i x_i P_i^0 - P = 0 \quad (7.389a)$$

при условии, что паровая фаза идеальная. Уравнение (7.389a) сильно нелинейное, поэтому при решении его обычными методами (например, секущих, деления отрезка пополам, касательных, Ньютона) требуется большое число итераций. Однако если последнее представить в виде

$$\Phi(T) = \ln \left(\sum_{i=1}^k \gamma_i x_i P_i^0 \right) - \ln P = 0, \quad (7.389b)$$

то число итераций снижается на одной-двух независимо от начального приближения и расчет ускоряется в 3—4 раза. Это объясняется тем, что после логарифмирования уравнение (7.389a) становится практически линейным.

Расчетные формулы для решения уравнения (7.389b) методом Ньютона при выражении коэффициентов активности по уравнению НРТЛ имеют вид

$$T^{(i+1)} = T^i - \Phi(T) dT/d\Phi(T);$$

$$dT/d\Phi(T) = 1/T \sum_{i=1}^k \gamma_i x_i P_i^0 \sum_{j=1}^k x_j P_j^0 \gamma_j \left(-A_{i2}/T + A_{i3}T + A_{i4} \right) + \sum_{j=1}^k x_j \left(G_{j1} \tau_{j1} \left(\frac{1}{\alpha_j^2} (\varphi_{j1} \pi_i - \rho_i) - \frac{1}{\alpha_i^2} (\pi_i + \rho_i) \right) + \right.$$

$$+ G_{ij} \left(\frac{1}{\pi_i} \left(\tau_{ij} + \sum_l \sigma_{lj} \tau_{lj} \left(\frac{1}{\pi_l^2} (\varphi_{lj} \pi_j - \rho_j) - \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. - \frac{1}{\pi_j^2} (\pi_j + \rho_j) \right) \right) + \left(\tau_{ij} - \frac{\lambda_j}{\pi_j} \right) \frac{1}{\pi_j^2} (\varphi_{ij} \pi_j - \rho_j) \right) \Bigg); \\ \tau_{ij} = c_{ij}/RT; \quad c_{ii} = 0; \quad \varphi_{ij} = \alpha_{ij} \tau_{ij}; \quad G_{ij} = \exp(-\varphi_{ij}); \\ \sigma_{ij} = G_{ij} x_i; \quad \pi_i = \sum_l \sigma_{li}; \quad \rho_i = \sum_j \sigma_{ji} \varphi_{ji}; \quad \alpha_{ij} = \alpha_{ji}; \\ \lambda_j = \sum_l \tau_{lj} \sigma_{lj}.$$

Задача определения параметров уравнений Вильсона и НРТЛ решается путем минимизации критериев рассогласования экспериментальных и расчетных данных вида

$$F_1 = \sum_i^k |y_{i \text{ эксп}} - y_{i \text{ расч}}| \omega_i/k;$$

$$F_2 = \sum_i^k |T_{i \text{ эксп}} - T_{i \text{ расч}}| \omega_i/k;$$

$$F_3 = \sum_i^k (|\gamma_{1i \text{ эксп}} - \gamma_{1i \text{ расч}}| + |\gamma_{2i \text{ эксп}} - \gamma_{2i \text{ расч}}|) \omega_i/k;$$

$$F_4 = a_1 F_1 + a_2 F_2 + a_3 F_3,$$

где ω — весовые коэффициенты.

Выбор нескольких критериев объясняется тем, что, во-первых, погрешность определения различных составляющих вектора состояния системы принципиально различна, а во-вторых, экспериментальные данные могут быть различными по полноте.

Функции критерия имеют сложный мультимодально-овраженный характер. Исследования изолиний критериев для ряда бинарных систем позволили сделать следующие выводы: чем ниже качество экспериментальных данных, т. е. чем больше погрешность эксперимента и чем меньше число точек, тем сложнее вид целевой функции; практически во всех случаях целевые функции имеют весьма выраженный овражный характер; минимумы критериев в общем случае не совпадают. Минимизация целевой функции производится по двухуровневому алгоритму. На первом уровне используется самообучающийся информационно-статистический метод, а на втором — алгоритм случайных направлений с обратным шагом. Переход от одного уровня на другой производится в диалоговом режиме, что позволяет более гибко управлять процессом расчета.

Программная реализация. Разработанные алгоритмы реализованы на языках программирования ПЛ-1, фортран-IV и ассемблер для ЭВМ типа ЕС и СМ в виде комплекса программ «Расчет

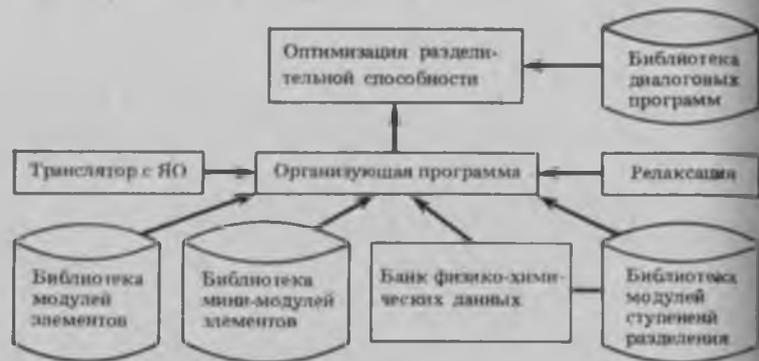


Рис. 7.36. Общая структура программного комплекса «Расчет гетерогенных систем разделения»

гетерогенных систем разделения». Общая структура пакета приведена на рис. 7.36.

Однопроходный транслятор с языка описания топологии (ЯО) позволяет в автоматическом режиме сформировать матрицу связи элементов технологической схемы, по которой производится сборка рабочей программы. Для его работы необходим объем оперативной памяти 70 Кбайт, скорость трансляции около 10 операторов в минуту.

Организирующая программа управляет процессом моделирования и выполняет следующие функции: ввод оттранслированного описания технологической схемы; сборку рабочей программы из модулей соответствующих библиотек; ввод физико-химических свойств смеси из банка физико-химических данных и режимных параметров рассматриваемой схемы; проверку правильности задания исходной информации и расчет начального приближения по расходам потоков, их составам и профилям температур в системе разделения с помощью мини-моделей элементов; интегрирование системы дифференциальных уравнений с использованием модулей релаксации и модулей библиотек элементов схемы; организацию прерываний для оперативного вмешательства в процесс расчета.

Сборка рабочей программы производится следующим образом. Во время работы транслятора определяется, какие элементы составляют систему разделения, и список соответствующих моделей передается управляющей программе. Кроме того, при запуске управляющей программы пользователь должен уточнить, какие модули из библиотеки модулей ступени разделения соответствуют логическим номерам моделей ступеней разделения, присвоенных элементам рассматриваемой схемы. Сформированный в резуль-

тате этого список модулей обрабатывается макропроцессором по стандартному шаблону, в результате чего получается набор управляющих директив для редактора связей операционной системы, которые описывают состав и структуру рабочей программы. Затем автоматически вызывается программа редактора связей, после чего управление передается собственно рабочей программе.

Такой подход к сборке рабочей программы (генерации) обладает рядом преимуществ. Во-первых, значительно сокращается объем рабочей программы, в которую автоматически включаются только те модули, которые действительно нужны для расчета конкретной системы. И, во-вторых, возможно формирование типовых вычислительных последовательностей в зависимости от класса задач.

Библиотеки полных и мини-моделей элементов системы разделения имеют одинаковую структуру и содержат по одному модулю для каждого типа элемента. Различие между полными и мини-моделями заключается в том, что полные предназначены для моделирования систем по точным математическим описаниям соответствующих элементов, а мини-модели включают в себя только уравнения общего материального баланса и предназначены для проверки корректности задания исходной информации и для автоматического расчета начальных приближений.

На верхнем уровне иерархии программного комплекса «Расчет гетерогенных схем разделения» программы оптимизации составляют систему уравнений (7.388), которая решается с помощью алгоритмов библиотеки диалоговых программ.

Прерывания процесса расчета для оперативного вмешательства пользователя предусмотрены на двух уровнях. На нижнем уровне обработка прерываний позволяет в диалоговом режиме изменять функции значения параметров модифицированного релаксационного алгоритма (фактор релаксации, точность расчетов) с целью ускорения сходимости. На верхнем уровне прерывания используются непосредственно при решении задачи оптимизации.

Связь прикладных программ с банком данных осуществляется по нескольким путям: через специальный пакет программ доступа, если требуются данные, непосредственно хранящиеся в базе; через библиотеку подпрограмм расчета свойств смесей, если требуются физико-химические свойства многокомпонентных смесей; через библиотеку подпрограмм расчета парожидкостного равновесия, если требуется решить прямую задачу расчета фазового равновесия. В любом случае пользователю нет необходимости в изучении способов физической организации баз данных.

7.4.3. Термoeкономическая оптимизация химических производств

Современная тенденция создания агрегатов большой единичной мощности, разработки энергозамкнутых производств связана с включением в иерархическую структуру химических производств

не только технологических, но и энерготехнических процессов подсистем. Крупнотоннажные установки в промышленности представляют собой, как правило, сложные энерготехнологические системы (ЭТС), имеющие целью производство химической продукции и внутреннее воспроизводство энергии.

Для корректного решения задач создания энергосберегающих производств последнее время широко используется термодинамический подход, позволяющий оценить качество энергоресурсов. Наиболее перспективной основой для проведения такого анализа и оптимизации ЭТС является эксергетическая концепция, вытекающая из второго начала термодинамики.

Эксергия есть мера превратимости энергии системы в любой вид организованной, т. е. не характеризующейся энтропией, энергии (например, в электроэнергию, механическую работу). Она характеризует работоспособность, техническую ценность энергии системы.

При анализе большинства энергетических и энерготехнологических процессов достаточно учесть физическую и химическую составляющие эксергии. Первая обусловлена разностью температур и давлений, вторая — химических потенциалов потока и окружающей среды. Тогда мольная эксергия потока вещества определяется по выражению [102]

$$E = H(T, P) - H_0(T_0, P_0) - T_0 [S(T, P) - S_0(T_0, P_0)] - \sum_{i=1}^m x_i (\mu_i - \mu_{i0}), \quad (7.390)$$

где H , S , E — мольные энтальпия, энтропия и эксергия потока вещества; μ_i , x_i — химический потенциал и мольная доля i -го компонента смеси; m — число компонентов; индексом «0» помечены параметры, относящиеся к окружающей среде. Увеличение энтропии многокомпонентной смеси, обусловленное эффектом смешения компонентов, не входит в величину энтропии смеси (7.390), а учитывается химическими потенциалами.

Особый интерес при расчете широко распространенных тепловых процессов представляет выражение эксергии теплового потока

$$E_q = \int_{T_2}^{T_1} \tau_0 dQ = Q\tau'_0 = Q \frac{T - T_0}{T}, \quad (7.391)$$

где τ_0 — эксергетическая температурная функция, равная КПД цикла Карно между температурой потока T и температурой окружающей среды T_0 ; τ'_0 — среднее значение в интервале от T_0 до T_1 .

Особый интерес представляет термозкономический анализ химического производства, основанный на тесной связи эксергетических

и стоимостных показателей [103]. Принципы термозаконономики открывают широкие возможности для декомпозиционного анализа и оптимизации ЭТС, учитывающих не только термодинамическое совершенство процесса, но и капитальные и другие неэнергетические затраты. Термозаконономическая оптимизация позволяет решить такие вопросы проектирования сложных ЭТС, как: определение оптимального компромисса между термодинамической эффективностью процесса и величиной неэнергетических затрат на его осуществление.

Термозаконономическая оптимизация ЭТС обычно имеет целью минимизацию приведенных затрат на единицу эксергии продуктовых потоков. Существующие методики, как правило, основаны на модификациях общего критерия оптимальности функционирования ЭТС [104]:

$$H = \min C^{\Pi} = \min \left\{ \left[\sum_i C_i^c E_i^c + \sum_k Z_k^{\text{нэн}} \right] / \sum_l E_l^{\Pi} \right\}, \quad (7.392)$$

где C^{Π} , C_i^c — стоимость единицы эксергии продукции и i -го сырьевого потока эксергии; E_l^{Π} , E_i^c — годовой выпуск l -й продукции и потребление i -го материального или энергетического сырьевого потока в единицах эксергии; $Z_k^{\text{нэн}}$ — годовая величина неэнергетических затрат (отчисления с капитальных вложений, постоянная часть эксплуатационных затрат) k -го элемента системы.

Из выражения (7.392) можно получить конкретный вид критерия оптимальности в зависимости от назначения рассматриваемой системы и специфических условий ее работы, т. е. ЭТС, вырабатывающая один продукт:

$$H_1 = \min \left\{ \left[\sum_i C_i^c E_i^c + \sum_k Z_k^{\text{нэн}} \right] / E_{\Pi} \right\}; \quad (7.393)$$

ЭТС, производящая один продукт заданного качества:

$$H_2 = \min \left\{ \left[\sum_i C_i^c E_i^c + \sum_k Z_k^{\text{нэн}} \right] / G_{\Pi} \right\}, \quad (7.394)$$

где G_{Π} — производительность системы по выпуску продукта; ЭТС, вырабатывающая один продукт заданного качества с фиксированной производительностью:

$$H_3 = \min \left[\sum_i C_i^c E_i^c + \sum_k Z_k^{\text{нэн}} \right]. \quad (7.395)$$

Следует отметить, что критерий (7.392) основан на предположении о близкой стоимости единицы эксергии продуктов комплексной ЭТС, когда затраты системы распределяются пропорционально выходной эксергии продуктов. Если же условия получения продуктов существенно различаются (например, при отводе одного из продуктов в начале, а другого — в конце энерготехнологической цепочки), то критерий вида (7.392) не отражает истинной эффек-

тивности комплексной ЭТС. Оптимизация с критерием (7.392) приводит к смещенной оценке оптимума: соотношение выпускаемой продукции изменяется в сторону увеличения выпуска продукта «более дешевой» эксергией.

В общем случае, для определения удельных показателей комплексной ЭТС [105] и формулирования термоэкономических критериев оптимальности [106] следует использовать приведенную эксергетическую производительность, учитывающую термоэкономическую неравноценность условий получения базового и прочих продуктов:

$$Q_{e, \text{пр}} = E_s + \sum_{l \neq s}^P E_l \frac{C_l}{C_s}, \quad (7.396)$$

где s — индекс базового продукта; P — общее число продуктов; C_s, C_l — стоимость единицы эксергии базового и прочих продуктов.

Для определения стоимости единицы эксергии продуктов удобно использовать методику, основанную на построении топологических моделей (сигнальные графы) процессов преобразования эксергии в ЭТС и распределения затрат по потокам эксергии [108].

Термоэкономический критерий оптимальности комплексной ЭТС, предназначенной для выпуска нескольких продуктов с равными термоэкономическими условиями получения, в общем виде запишется следующим образом:

$$R = \min \left\{ \left(\sum_i C_i^c E_i^c + \sum_k Z_k^{\text{пр}} \right) / Q_{e, \text{пр}} \right\}. \quad (7.397)$$

Критерий (7.397) следует применять при решении задач оптимального проектирования, критерии (7.393) — (7.395) соответствуют наиболее распространенным задачам оптимизации действующих производств.

Широкому внедрению эксергетической концепции и принципов термоэкономики в инженерную и проектную практику препятствуют известные вычислительные трудности, связанные с расчетом эксергии. Для их преодоления необходима разработка развитого проблемно-ориентированного математического и программного обеспечения.

Пакеты прикладных программ, ориентированные на моделирование и оптимизацию ЭТС, должны включать программное обеспечение для расчета эксергии неидеальных многокомпонентных смесей, находящихся в различных фазовых состояниях. Так как при заданных параметрах окружающей среды эксергия потока вещества является функцией его состояния, программные модули для расчета эксергии удобно включить в состав подсистемы «Физико-химические свойства смесей», предназначенной для расчета волюметрических, термодинамических и транспортных свойств смесей.

Машинно-ориентированная методика расчета эксергии должна удовлетворять ряду требований: обеспечить высокую точность расчета; учитывать неидеальность смесей; иметь единую форму для многокомпонентных смесей, находящихся в различных фазовых состояниях.

В наибольшей степени этим требованиям удовлетворяет методика, базирующаяся на фундаментальном определении эксергии [102]:

$$e(X, T, P) = H(X, T, P) - H(X_0, T_0, P_0) - T_0[S(X, T, P) - S(X_0, T_0, P_0)], \quad (7.398)$$

где $H(X, T, P)$, $S(X, T, P)$ — мольные энтальпия и энтропия неидеальной смеси.

При расчете эксергии для определения энтальпии и энтропии неидеальных смесей удобно воспользоваться одним из эмпирических уравнений состояния [107], описывающим волюметрические свойства как газовой, так и жидкой фаз:

$$P = P(X, T, \rho, K), \quad (7.399)$$

где ρ — мольная плотность неидеальной смеси; K — вектор констант уравнения состояния.

Решив уравнение состояния относительно мольной плотности смеси (при заданных T, P, X), энтальпию и энтропию неидеальных многокомпонентных смесей можно найти из выражений

$$H(X, T, P) = \sum_{i=1}^m x_i H_i^0(T) + H_m^D(X, T, \rho, K), \quad (7.400)$$

$$S(X, T, P) = \sum_{i=1}^m x_i [S_i^0(T) - R \ln x_i] + S_m^D(X, T, \rho, K), \quad (7.401)$$

где $H_i^0(T)$, $S_i^0(T)$ — зависимость мольной энтальпии и энтропии i -го компонента в идеальном газе от температуры; $H_m^D(X, T, \rho, K)$, $S_m^D(X, T, \rho, K)$ — зависимости изотермических отклонений энтальпии и энтропии реальной смеси от идеального состояния, полученные на основе уравнения состояния [107].

Уравнение состояния целесообразно использовать не только для расчета эксергии, но и термодинамических свойств смесей: теплоемкости, коэффициента сжимаемости, фугитивности, внутренней энергии и т. д. Иногда удается использовать его и для расчета парожидкостного равновесия, процессов однократного испарения и конденсации, т. е. положить в основу всей подсистемы расчета волюметрических и термодинамических свойств смесей.

В качестве примера построения пакета прикладных программ, ориентированного на термоэкономическую оптимизацию ЭТС, рассмотрим интерактивную систему оптимизации тепловых систем низ-

котемпературного газоразделения крупнотоннажных производств этилена. Система предназначена для эксергетического, термoeкономического анализа, моделирования и термoeкономической оптимизации технологических режимов низкотемпературных ЭТС заданной топологии с известными конструкционными параметрами элементов.

Система включает следующие подсистемы и пакеты программ (рис. 7.37): пакет проблемно-ориентированных прикладных программ — математических моделей типовых процессов низкотемпературного газоразделения и энергетических подсистем; подсистему расчета волюметрических, термодинамических, транспортных свойств и эксергии многокомпонентных смесей легких углеводородов и неуглеводородных газов на основе уравнения состояния Бенедикта—Вебба—Рубина; программы пользователя — математическую модель исследуемой ЭТС, включающую модели технологических и энергетических подсистем и использующую модули всех остальных подсистем и пакетов; методo-ориентированную интерактивную подсистему оптимизации, базирующуюся на методах нелинейного программирования; программы методов вычислительной математики, используемых при построении моделей; сервисное математическое обеспечение.

Модульный принцип построения системы позволяет легко расширить ее, изменяя функции по мере накопления знаний об объекте исследования. Интерактивный режим построен по принципу ранжирования директив: первичные директивы определяют основное действие, вторичные и последующие конкретизируют детали задания на моделирование и оптимизацию ЭТС. Переход к директивам низшего уровня производится в естественном порядке, возврат на верхний уровень возможен посредством обработки внешних прерываний.

Интерактивный режим позволяет пользователю: выбрать вариант постановки задачи термoeкономической оптимизации (из заданной пользователем совокупности критериев оптимальности и соответствующих наборов оптимизирующих переменных); выбрать варианты расчета технологических подсистем (по уровню детализации моделей); выбрать вариант расчета каждой из энергетических подсистем (эксергетическая производительность подсистемы, обобщенная термoeкономическая модель подсистемы данного типа, традиционная математическая модель); выбрать метод безусловной оптимизации из имеющихся в библиотеке и задать его параметры; выбрать и задать параметры метода условной оптимизации; применить метод декомпозиционной релаксации, сократив число оптимизирующих переменных; провести выборочное сканирование области поиска по одной или группе переменных; выбрать варианты печати результатов моделирования в начальной и конечной точке поиска, промежуточных результатов оптимизации.

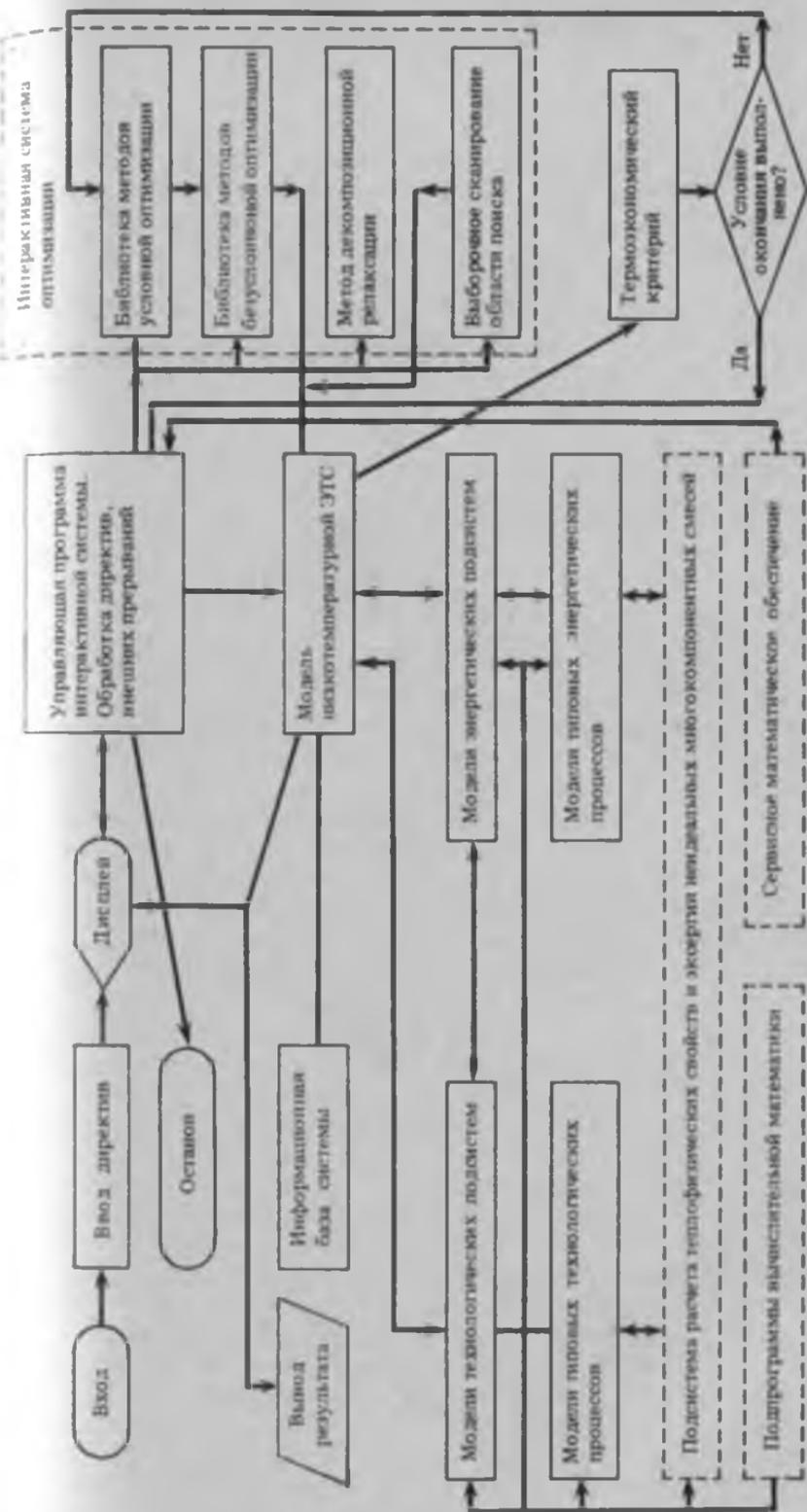


Рис. 7.37. Информационно-логическая схема интерактивной системы термоэкономической оптимизации тепловых систем низкотемпературного газоразделения крупнотоннажных производств этилена

В системе предусмотрено оперативное вмешательство в ход вычислений путем внешних прерываний с инженерного пульта ЕС ЭВМ, обработка которых позволяет выйти на режим диалога и изменить параметры задания на оптимизацию: например, сменить метод безусловной минимизации, провести декомпозиционную релаксацию области поиска, вывести на печать более полную информацию о моделируемой ЭТС и т. п. Библиотеки алгоритмов условной и безусловной минимизации построены по принципу взаимного дополнения включенных в них методов, что позволяет в каждом конкретном случае выбрать метод, наиболее адекватный решаемой задаче.

7.4.4. Моделирование и оптимизация технологических схем

Проектирование технологического процесса или производства включает четыре основных взаимосвязанных этапа: синтез, анализ, оценка, оптимизация. Каждый из этапов в САПР обычно реализован в виде подсистем и выполняет вполне определенные задачи. Получение оптимального варианта проекта возможно лишь при разумном их сочетании. На этапе синтеза решается задача получения некоторого варианта (или вариантов) схемы, который (которые) затем подвергается анализу, оценке и оптимизации. В общем случае взаимодействие отдельных этапов проектирования приведено на рис. 7.38.

Роль этапа оптимизации имеет важнейшее значение при разработке технологической схемы, особенно если вариант схемы, полученный на этапе синтеза, далеко неоптимальный или необходимо проанализировать множество других вариантов и выбрать оптимальный. Эта задача весьма трудоемкая, и эффективное выполнение ее существенно зависит от используемой подсистемы моделирования и оптимизации.

Оптимизация технологической схемы обычно проводится с помощью моделирующих систем при заданной топологии производства. Как и САПР, моделирующие системы ориентированы на широкого пользователя и поэтому обладают всеми атрибутами развитых систем: имеют доступный входной язык, развитую диагностику, диалоговый режим работы. Ниже дана характеристика системы ASPEN, предназначенной для моделирования и оптимизации широкого класса технологических производств [108]. Система построена по модульному принципу и допускает дальнейшее развитие без существенных изменений.

Информационная база системы. В отличие от других систем ASPEN оперирует с двумя типами компонентов, а именно с компонентами или псевдокомпонентами, характеризующимися обобщенными свойствами чистых веществ (молекулярный вес, критические параметры, плотность, вязкость и т. д.), и с веществами, характеризующимися элементарным составом или обобщенными

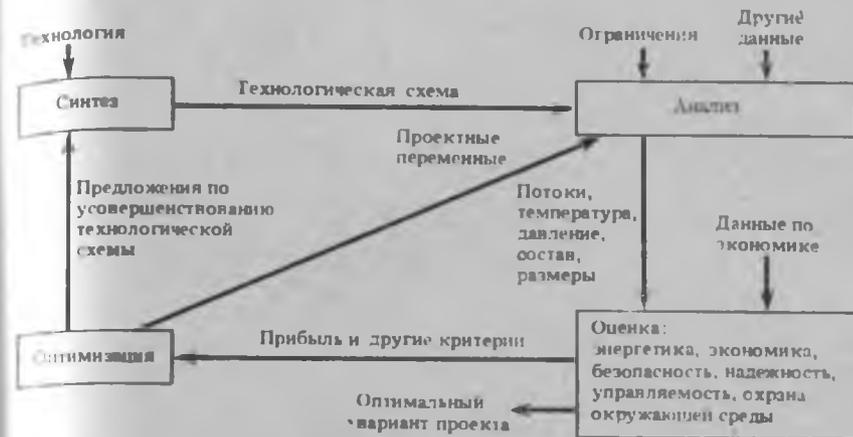


Рис. 7.38. Взаимосвязь этапов проектирования

свойствами. Например, каменный уголь можно охарактеризовать элементарным составом (процентное содержание углерода, водорода, азота, серы, кислорода, хлора и золы) или такими показателями, как влажность, процентное содержание летучих веществ, количество фиксированного углерода и т. д. Во всяком случае в результате применения технологической операции к данным веществам имеется возможность оценить соответствующее изменение их свойств.

Система поддерживается соответствующей подсистемой физико-химических свойств. Каждая модель может обращаться за необходимыми свойствами к этой подсистеме. Набор свойств компонентов достаточно широк — он включает до 200 наименований (капальность, энтропия, свободная энергия, молярный объем, вязкость, коэффициент фугитивности). Свойства могут быть рассчитаны для чистых компонентов, смесей или компонентов в смеси. Передача данных в программу производится под управлением монитора. Для этого ему сообщается соответствующая информация в виде кодов, указывающих, например, основные свойства, наличие компонентов в смеси, температуру, давление, состав и место расположения этих данных в памяти ЭВМ, доступной программам. Монитор вызывается однажды и рассчитывает все необходимые свойства. Методы, с помощью которых рассчитываются свойства, задаются пользователем на входном языке системы. Полное определение всех основных программ для расчета свойств производится с помощью набора операций для всей технологической схемы или для отдельных блоков. Пользователь имеет возможность создавать новые наборы программ или изменять существующие. Имеется четыре уровня определения наборов данных для расчета свойств, отличающиеся сложностью для пользователя. Одни из них не

требуют знания не вычислительной техники, не термодинамики (стандартные наборы программ), для формирования других, наоборот, нужно располагать соответствующими знаниями. Аналогичная процедура подготовки данных имеется и для веществ-соединений.

Потоки в системе. Различают два типа потоков: материальные и информационные. Каждый из них может быть разделен на две части и более, например, из парожидкостной смеси, содержащей инертное твердое вещество, пользователь может выделить последнее как отдельный поток. Материальные потоки, в свою очередь, подразделяются на два типа в зависимости от составляющих компонентов. Это поток, содержащий компоненты в обычном понимании (стандартный), и поток, содержащий различные соединения или смеси (нестандартный).

Стандартный поток характеризуется десятью основными свойствами: общее и покомпонентные количества в мольном измерении, температура, давление, удельные энтальпия и энтропия, плотность, мольные доли пара и жидкости и молекулярный вес. Имеется возможность вводить дополнительные атрибуты типа распределения частиц по размерам и т. д.

Нестандартный поток определяется аналогичным образом, за тем исключением, что общие и покомпонентные количества даются в массовых единицах, поскольку для такого потока отсутствует молекулярный вес. Значения свойств компонентов нестандартных потоков передаются между элементами схемы вместе с количествами, поскольку в результате технологических операций они изменяются (в отличие от стандартных потоков). При этом передаются только переменные характеристики.

Информационный поток не содержит компонентов, а только соответствующие атрибуты. Обычно этот тип потоков используется для описания потоков энергии (тепла или работы), передаваемых от одного элемента схемы к другому.

Такие характеристики потоков, как распределение частиц по размерам и плотность распределения частиц, определяются самой системой. Однако пользователь может задать и другие характеристики, но при этом он должен разработать и соответствующее математическое обеспечение.

Структура системы. ASPEN построена по модульному принципу. Функционально элементы (блоки) предназначены для преобразования одного или нескольких входных потоков в выходные. Взаимосвязь блока с другими элементами системы приведена на рис. 7.39. С точки зрения последовательности расчетов схемы принят модульно-последовательный подход, в соответствии с которым сначала выделяются части схемы, охваченные рециклами, а затем выбираются переменные, позволяющие разорвать рециклы и рассчитывать схему как линейную последовательность элементов. Имеется возможность автоматически определять последователь-



Рис. 7.39. Модуль системы и его функциональные связи

ность расчета схемы. При этом не делается различия между блоками, обеспечивающими сходимость решения и управления. Допускается одновременное сведение материального и теплового балансов вместе с уточнением проектных переменных.

По структуре ASPEN относится к предпроцессорным системам, когда входной транслятор генерирует исполнительную программу на языке фортран (рис. 7.40), в дальнейшем эта программа вместе с программами пользователя транслируется, редактируется и выполняется. На шаге редактирования подсоединяются необходимые модули системы и пользователя. Такой подход позволяет строить исполнительную программу непосредственно для решаемой задачи с массивами переменной размерности и тем самым исключить непроизводительные затраты памяти. Система ориентирована также на файловую структуру. Файлы используются для хранения входной программы, промежуточных результатов, объектной программы и результатов расчета. Это позволяет в любое время прохождения задачи проанализировать любую информацию, связанную с ней, а также повторить расчеты с любого этапа решения.

Входной язык системы. Язык ориентирован на специалистов в области химической технологии и может быть отнесен к языкам ключевых слов. Синтаксически выделяются параграфы, предложения и слова. Параграф начинается с ключевого слова первого уровня и может содержать одно или несколько предложений. Каждое предложение начинается с ключевого слова второго уровня, характеризующего категорию данных предложения. И, наконец, ключевые слова третьего уровня характеризуют входные данные, их значениями являются числа. Например, запись вида

```
BLOCK F1      FLASH = PT2
PARAM        TEMP = 310 PRES = 1 [ATM]
```

означает следующее. Первичное ключевое слово BLOCK означает, что параграф содержит блок данных, обозначаемый пользователем



Рис. 7.40. Последовательность обработки информации в системе ASPEN

как F1, а вычислительный модуль (FLASH-PT2) позволяет рассчитывать двухфазный аппарат однократного испарения при заданных температуре и давлении. Ключевое слово второго уровня (PARAM) означает, что предложение содержит параметры, идентифицируемые словами третьего уровня (TEMP и PRES). Значениями параметров могут быть как отдельные числа, так и векторы значений.

Все модули оперируют с данными в системе измерений СИ, однако пользователь может задать и любую другую систему единиц измерения во входной информации. Операторы входного языка записываются произвольно по формату, за тем исключением, что первичное ключевое слово должно занимать первую позицию. Они могут следовать во входном потоке произвольно, поскольку перед выполнением производится их сортировка и соответствующая перестановка. При записи предложений можно использовать и принцип умолчания (для ключевых слов), однако тогда затрудняется при необходимости ссылка на данные или блоки.

7.5. Аппроксимационные математические модели

Основным подходом к решению задачи проектирования является использование декомпозиционных принципов, в соответствии с которыми общая задача подразделяется на отдельные этапы (относительно независимые) и выходная информация одного является входной для другого. Ввиду многозначности реализации каждого из этапов (наличие различных вариантов технологических

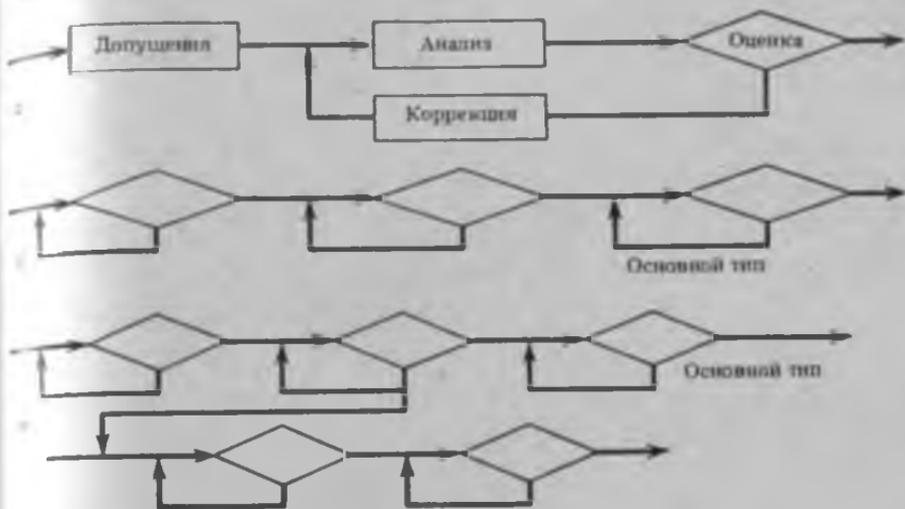


Рис. 7.41. Типовые проектные процедуры

а — основной тип; б — периодический процесс; в — разветвляющийся процесс

и технических решений) появляются итерационные циклы, охватывающие обратными связями отдельные этапы. Кроме того, в технологической схеме имеются рециклические материальные и энергетические потоки, параметры которых при декомпозиционной стратегии проектирования необходимо уточнять итерационно. Поэтому проектирование оптимальных технологических схем заключается в многократном расчете отдельных элементов и их комплексов с целью выбора наилучшего технического решения и уточнения параметров потоков. В связи с этим (как отмечалось в предыдущем разделе) моделирующие системы строятся как многошаговые с возвратом на предыдущие шаги в зависимости от результатов анализа получаемой промежуточной информации.

Различают несколько типовых проектных процедур, которые могут быть отнесены как к отдельным этапам, так и ко всей задаче проектирования [109]. В соответствии с первым (рис. 7.41, а) пользователь, исходя из цели проектирования и приобретенного опыта, производит технологическую постановку задачи и принимает соответствующие допущения. Затем на базе имеющегося прикладного математического обеспечения осуществляет решение поставленной задачи и проводит анализ полученных результатов. Если результаты анализа не удовлетворяют технологическим требованиям, то допущения пересматриваются и процесс повторяется. Такой тип проектной процедуры называется основным. При проектировании декомпозированной технологической схемы основная проектная процедура повторяется для каждого элемента или этапа. Если конечная цель проектирования дости-

гается путем повторения некоторых последовательностей основных проектных процедур, то такой процесс называется **периодическим** (рис. 7.41, б). Возможен также **развивающийся** процесс проектирования, когда при проектировании отдельных элементов схемы производится поиск и анализ новых технических и технологических решений (рис. 7.41, в).

Многовариантность отдельных задач в процессе поиска оптимального в смысле некоторого критерия решения, а также необходимость итерирования по отдельным параметрам схемы представляет определенные требования к программному обеспечению системы и, в частности, к быстродействию моделей. В свою очередь быстродействие модели часто достигается за счет ее точности. Поэтому при разработке моделей приходится решать компромиссную задачу: модель должна обладать высокой точностью и быстродействием.

Низкие по точности модели принято классифицировать как приближенные, и область их применения обычно ограничивается прикидочными расчетами, в результате которых выявляются качественные характеристики объекта. Получение же количественных оценок, как правило, производится на базе точных моделей. Получение количественных зависимостей за практически приемлемое время счета возможно как результат снижения размерности задачи поиска (сокращения числа просматриваемых вариантов) или как результат разработки точных и быстродействующих моделей. В первом случае основным приемом является использование различного рода ограничений, основанных на физико-химических, технологических и другого рода предпосылках (применение эвристических правил, эволюционной стратегии, фундаментальных закономерностей протекания процесса). Во втором случае задача заключается в разработке быстродействующих алгоритмов решения уравнений математического описания, использования аппроксимационных моделей. Снижение размерности пространства поиска оптимального варианта широко используется при разработке алгоритмов синтеза технологических схем (см. гл. 8). Обычно с решением этой же задачи связана разработка аппроксимационных моделей.

Существует несколько подходов к созданию быстродействующих моделей, отличающихся исходными предпосылками и совокупностью принимаемых допущений.

Модели, основанные на идеализированном представлении объекта. Основу таких моделей составляют уравнения, описывающие протекание процесса в идеальных условиях: но гидродинамике — идеальное вытеснение или смешение; массопереносу — идеальная ступень контакта; свойствам смеси — идеальные жидкая и паровая (газовая) фазы; химическому превращению — брутто-реакции; теплопереносу — постоянство коэффициента теплопередачи, теплоемкости. В результате математическое

описание представляется в виде системы конечных уравнений (чаще всего линейных), отражающих балансовые соотношения. Математические модели, основанные на таком описании, содержат минимальное число итерлируемых переменных, что делает их компактными и быстродействующими. В частных случаях идеализированные модели могут иметь практическое значение. Это, например, модель абсорбера в изотермических условиях при выражении фазового равновесия через константы Генри. Математическое описание статики процесса выражается в виде системы линейных уравнений, решение которой позволяет найти распределение концентраций компонентов по высоте колонны. Аналогично математическое описание непрерывного реактора смешения с линейной кинетикой представляет собой систему линейных алгебраических уравнений. В общем случае принятие разумных допущений по отдельным составляющим позволяет существенно упростить математическую модель.

Модели, основанные на коэффициентах функциональных связей. Основным достоинством таких моделей является линейное соотношение между входными и выходными переменными (потоками). Это и определяет их компактность и быстродействие. В общем виде математическая модель представляется в виде

$$Y = AX, \quad (7.402)$$

где Y , X — векторы выходных и входных переменных; A — матрица преобразования или операционная матрица. Коэффициенты матрицы характеризуют количественные соотношения между входными и выходными переменными и могут быть самой различной природы. Например, для процессов экстракции, ректификации это могут быть коэффициенты распределения компонентов между потоками продуктов; для совокупности аппаратов — это коэффициенты функциональных связей. Очевидно, основная сложность применения таких моделей состоит в достоверности коэффициентов матрицы. Вообще говоря, это могут быть не только константы, но и функциональные зависимости, учитывающие взаимосвязь между определяющими характеристиками процесса, вероятностные оценки и т. д.

Модели, основанные на линеаризации. При оптимизации сложных химико-технологических систем плодотворной оказывается идея использования двухуровневых моделей — точных и приближенных. Точная модель представляет собой детальное описание рассматриваемого процесса на всех уровнях (например, по фазовому равновесию, кинетике химического превращения и массопереносу и т. д.). Однако ее применение при решении задач оптимизации ХТС весьма громоздко и времяемко. Поэтому основным назначением точных моделей является получение и коррекция упрощенных моделей. Упрощенная модель используется вместо точной итеративно: сначала совместно с ограниче-

ниями и целевой функцией определяются значения необходимых параметров процесса (ХТС), а затем на их основе проводится коррекция параметров упрощенной модели по точной. Эта последовательность действий продолжается до тех пор, пока параметры упрощенной модели не будут изменяться в заданных пределах.

В простейшем случае упрощенная модель представляет собой линейное соотношение между векторами входных X и выходных Y переменных:

$$Y = AX + B, \quad (7.403)$$

где A — матрица частных производных выходных переменных по входным. Обычно коэффициенты матрицы определяются в результате численного дифференцирования при нанесении возмущений по переменным на точной модели и эта процедура достаточно времязатратная, особенно при высокой размерности матрицы и сложной модели. При всей привлекательности такие модели обладают тем недостатком, что при существенном отклонении решения от условий определения коэффициентов линейной модели точность решения весьма низкая.

Модели, основанные на методах планирования эксперимента. Распространенным способом «свертки» громоздких моделей является использование методов корреляционного и регрессионного анализа. Этот способ получения приближенной модели может быть использован наравне с линеаризацией и часто более эффективно. Получаемые в результате математические модели достаточно просты и связывают значение выходного параметра y как функцию совокупности входных (x_1, x_2, \dots, x_n) в виде полиномов, например:

$$y = a_0 + \sum_i a_i x_i + \sum_{i,j} a_{ij} x_i x_j + \sum_j a_{jj} x_j^2 + \dots \quad (7.404)$$

Широкое применение такие модели нашли в алгоритмах управления технологическими процессами. Аналогично линеаризованным моделям коэффициенты уравнения регрессии могут быть определены путем планирования эксперимента на точной модели [110]. Модели в виде уравнений регрессии обладают тем достоинством, что могут применяться в широкой области изменения входных переменных (возмущений), а именно в области определенных коэффициентов.

Модели, основанные на аппроксимации точных моделей. Идея использования двухуровневых моделей — точных и приближенных — оказывается плодотворной при любом типе аппроксимационной. Однако чем менее точная аппроксимационная модель, тем чаще появляется необходимость коррекции ее параметров и тем менее эффективно ее использование. Желательно, чтобы аппроксимационная модель воспроизводила реальные условия протекания процесса в более широком диапазоне изменения пара-

метров. Такими свойствами в большей степени обладают модели, полученные на основе фундаментальных закономерностей, даже в упрощенном варианте, но сохраняющие в основном все свойства точных. В связи с этим требования к ним можно сформулировать следующим образом [117]: число уравнений приближенной модели должно быть намного меньше, чем точной; переменными приближенной модели должны быть входные и выходные потоки (покомпонентный расход, температура, давление), параметры оборудования, рассчитываемые свойства (например, тепловая нагрузка), а также внутренние переменные, свойственные данной модели; число степеней свободы приближенной модели должно быть таким же, что и у точной; уравнения приближенной модели должны быть фундаментальными, а не эмпирическими соотношениями; параметры приближенной модели, полученные как результат базовых решений точной модели, должны обеспечивать точное совпадение обоих решений; уравнения приближенной модели, так же как и матрицы частных производных должны рассчитываться аналитически без каких-либо вспомогательных итерационных расчетов или вычислений термодинамических функций.

Необходимость использования приближенных моделей очевидна при расчете многоступенчатых процессов разделения многокомпонентных смесей (ректификация, абсорбция, экстракция и т. п.). Экспериментально показано [112], что около 80% общих затрат связано с расчетом термодинамических свойств, так как необходимо многократно рассчитывать равновесие фаз на каждой из ступеней. Поэтому нужно максимально уменьшить число обращений к расчету свойств в процессе последовательных приближений. Это можно сделать следующим образом.

Строго говоря, константа фазового равновесия является функцией температуры (через давление пара компонента) и состава (через коэффициент активности). Если учитывать лишь температурную зависимость (для смесей, близких к идеальным), то можно воспользоваться следующей аппроксимацией:

$$\ln(K_v P) = A + B \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T^*} \right), \quad (7.405)$$

где T^* — базовая температура; P — общее давление; K_v — константа фазового равновесия ведущего компонента смеси, по отношению к которому определяются все остальные константы:

$$K_i = \alpha_i K_v. \quad (7.406)$$

Если определить значения параметров A и B по точной модели при различных температурах, то отпадает необходимость в определении констант на каждой итерации при расчете равновесных составов и температур. Подобная аппроксимация была использована при разработке модели абсорбера [111]. Модель содержит

уравнения типа (7.405) для верхней и нижней тарелок колонны, уравнения общего покомпонентного материального баланса, теплового баланса колонны, стехиометрические соотношения и аппроксимационное уравнение для расчета состава по высоте. В итоге получена модель, содержащая $(2n + 5)$ уравнений вместе с $(3n + 3)N$ уравнений в точной модели (здесь n — число компонентов, N — число ступеней).

При учете зависимости констант равновесия от температуры и состава можно воспользоваться аппроксимацией вида [112]

$$\ln K_i = \ln (f_i^0/p) + a_{1i}x_i + a_{2i}, \quad (7.407)$$

где f_i^0 — фугитивность. Отсюда коэффициент активности равен

$$\ln \gamma_i = a_{1i}x_i + a_{2i}. \quad (7.408)$$

Аналогично, коэффициенты a_{1i} и a_{2i} определяются по точной модели в необходимом диапазоне температур. Легко видеть, что при использовании метода Ньютона—Рафсона для вычисления равновесных составов и температуры частные производные можно найти аналитически.

Рассмотренные способы далеко не исчерпывают всех возможностей получения аппроксимационных моделей. При анализе конкретной точной модели, вероятно, можно всегда найти возможности «свертки», не теряя информативности и управляя точностью последней. Такой путь получения аппроксимационных моделей отдельных процессов, как и производств, представляется наиболее приемлемым.

ЛИТЕРАТУРА

1. Математика в современном мире. М.: Мир, 1967. 205 с.
2. Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: Химия, 1971. 496 с.
3. Клецес А. С. Представление знаний // Прикладная информатика. М.: Финансы и статистика. 1983. Вып. 1. С. 49—94.
4. Вольфенгаген В. Э., Воскресенская О. В., Горбанев Ю. Г. Система представления знаний с использованием семантических сетей // Вопросы кибернетики. М.: Научн. совет по комплексной пробл. «Кибернетика» АН СССР. 1979. С. 49—69.
5. Кафаров В. В., Ветухин В. П., Положенцев В. П. Обеспечение диалогового взаимодействия в операционных системах химической технологии // Докл. АН СССР. 1982. Т. 262, № 1. С. 150—154.
6. Ершов А. П. Научные основы доказательного программирования // Вест. АН СССР. 1984. № 10. С. 9—19.
7. Грис Д. Наука программирования. М.: Мир, 1984. 416 с.
8. Кафаров В. В., Дорозов И. П. Системный анализ процессов химической технологии: Основы стратегии. М.: Наука, 1976. 500 с.
9. Андрианов А. И., Задыхайло И. Б. и др. Тенденции в развитии суперЭВМ: Комплексный подход к проектированию суперЭВМ // Прикладная информатика. М.: Финансы и статистика, 1983. Вып. 1. С. 183—197.
10. Вычислительные машины и мышление / Под ред. Э. Фейгенбаума, Фельдмана. М.: Мир, 1967. 552 с.

11. *Важенин В. П., Воронцов Ю. В., Герман В. А.* и др. Системотехника и математическое моделирование // Тр. РТИ АН СССР. 1973. № 12. С. 5—244.
12. *Поляк Ю. Р.* Вероятностное моделирование на ЭВМ. М.: Сов. радио, 1971. 400 с.
13. *Поляк Ю. Р.* Современные методы управления радиотехническими системами // Тр. РТИ АН СССР. 1977. № 29. С. 3—13.
14. *Брябрич В. М.* и др. Реализация модельной базы данных. М.: ВЦ АН СССР, 1979. 21 с.
15. *Вольфенгаген В. Э.* и др. Об одной организации интеллектуального банка данных с использованием фреймов // Вопросы кибернетики. М.: Научи. совет по комплексн. проблеме «Кибернетика» АН СССР. 1979. С. 70—92.
16. *Кафаров В. В., Ветохин В. П.* Основы построения операционных систем в химической технологии. М.: Наука, 1980. 430 с.
17. Энциклопедия кибернетики. Киев: Наук. думка, 1974. № 2. 613 с.
18. *Кроу К.* Математическое моделирование химических производств. М.: Мир, 1973. 392 с.
19. *Lee E. S.* Quasilinearization and invariant imbedding with application to chemical engineering and adaptive control. N. Y.: Acad. press, 1968. 326 p.
20. *Ветохин В. П., Чугунов А. М., Кафаров В. В.* Новая методика расчета сложной ректификационной колонны // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 1976. Т. 19, № 12. С. 1903—1906.
21. *Эльсгольц А. Э.* Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление. М.: Наука, 1969. 424 с.
22. Требования к алгоритмам: Оформление и документирование. М.: Статистика, 1975. 64 с.
23. *Ветохин В. П., Глебов М. Б.* Системный анализ азеотропной и экстрактивной ректификации // Итоги науки и техники. Процессы и аппараты хим. технол. М.: ВИНТИ, 1979. Т. 6. С. 116—185.
24. *Коган В. Б.* Азеотропная и экстрактивная ректификация. Л.: Химия, 1971. 432 с.
25. *Фролова А. К., Ханина Е. П., Павленко Т. Г.* Некоторые аспекты разделения азеотропных смесей // Тез. Всесоюз. конф. по теории и практике ректификации. Северодонецк, 1984. С. 30—32.
26. *Snyder L. R.* Classification of the solvent properties of common liquids // J. Chromatogr. Sci. 1978. Vol. 16, N 6. P. 223—234.
27. *Berg L.* Separation of benzene and toluene from close boiling nonaromatics by extractive distillation // AIChE Journal. 1983. Vol. 29, N 6. P. 961—966.
28. *Kolbe L., Gmelting J., Onken U.* Selection of solvents for extraction distillation using predicted and correlated VLE data // 3rd Intern. Symp. Distillation L., 1979. P. 1.3/23—1.3/37.
29. *Mawde A. D., Whitmore R. L.* A generalized theory of sedimentation // Brit. J. Appl. Phys. 1958. Vol. 9. P. 477—482.
30. *Tame K. W.* The drag on a cloud of spherical particles in low Reynolds number flow // J. Fluid. Mech. 1969. Vol. 38. P. 537—546.
31. *Крайко А. П., Нугматулин Р. П.* и др. Механика многофазных сред // Итоги науки и техники. Гидромеханика. М.: ВИНТИ, 1972. Т. 6. С. 93—175.
32. *Gillespie T., Redeal E. K.* The coalescence of drops at an oil-water interface // Trans. Faraday Soc. 1956. Vol. 52, N 2. P. 173—183.
33. *Jeffreys G. V., Hawksley J. L.* Coalescence of liquid droplets in two-component-two-phase systems. I: Effect of physical properties on the rate of coalescence // AIChE Journal. 1965. Vol. 1, N 3. P. 413—423.
34. *Hartland S.* The coalescence of a liquid drop at a liquid-liquid interface // Trans. Inst. Chem. Eng. 1967. N. 47. P. 97—101.
35. *Chappellear D. C.* Models of liquid drop approaching an interface // J. Colloid and Interface Sci. 1961. N 16. P. 186—190.

36. *Liem A. J. S., Woods D. R.* Application of a parallel disc model for uneven film thinning // *Canad. J. Chem. Eng.* 1974. N 52. P. 222—227.
37. *Vijayan S., Pontor H. B.* Inter-droplet coalescence in liquid and gas media // *Teside.* 1974. N 11. P. 241.
38. *Mockey G. D. M., Mason D.* The gravity approach and coalescence of fluid drops at liquid interface // *Canad. J. Chem. Eng.* 1963. N 41. P. 203.
39. *Charles G. E., Mason S. G.* Coalescence of liquid drops with flat liquid-liquid interface // *J. Colloid and Interface Sci.* 1960. N 15. N3. P. 236—267.
40. *McAvoy R. M., Kintner R. C.* Approach of two identical rigid spheres in a liquid field // *Ibid.* 1965. N 20. P. 188—190.
41. *Прилуцкий Г. Я., Волок Л. В.* О расслоении фаз дисперсий жидкость—жидкость // *ЖИХ.* 1970. Т. 43, № 12. С. 2669—2675.
42. *Сой С.* Гидродинамика многофазных систем. М.: Мир, 1971. 536 с.
43. *Аврутов М. Б., Ендлер Б. С.* Распределение частиц по высоте сосуда при периодическом осаждении полидисперсных суспензий // *ТОХТ.* 1975. Т. 9, № 6, С. 941—943.
44. *Jeffreys G. V., Davies G. A., Pitt K.* Rate of coalescence of the dispersed phase in a laboratory mixer settler unit // *AIChE Journal.* 1970. Vol. 16, N 5. P. 823—827.
45. *Smith D. V., Davies G. A.* Coalescence in droplet dispersions // *AIChE Symp. Ser.* 1972. Vol. 68. N 124. P. 1—10.
46. *Ветозин В. И., Глебов М. Б., Кафаров В. В.* Моделирование процесса расслаивания гетерофазных жидких систем // *Шав. вузов. Химия и лим. технология.* 1979. Т. 22, № 4. С. 388—492.
47. *Кафаров В. В., Ветозин В. И., Глебов М. Б.* Математическая модель непрерывного расслаивания гетерофазных жидких смесей // *Докл. АН СССР.* 1980. Т. 253, № 4. С. 926—929.
48. *Брель Ж. А., Иняева Г. В., Мозжухин А. С.* и др. Математическое моделирование промышленного разделения многокомпонентных многофазных систем // *Нефтепереработка и нефтехимия. ВНИИНефть.* 1973. Вып. 3. С. 138—152.
49. *Block U., Hengler B.* Development and application of a simulation model for three-phase distillation // *AIChE Journal.* 1976. Vol. 22, N 3. P. 582—589.
50. *Null H. R.* Energy economizing separation processes // *Chem. Eng. Progr.* 1980. Vol. 19, N 8. P. 42—49.
51. *Хаттори Ш.* Технология дистилляции с экономией энергии // *Кемиякару Энджинирингу.* 1980. Т. 25, № 8. С. 683—689.
52. *Harker J. H.* Economic balance in distillation processing // *AIChE Journal.* 1979. Vol. 25, N 4. P. 39—40.
53. *Чайцевец П. С., Майков В. И., Усикин И. П.* Исследование связи термодинамических и технико-экономических критериев оптимизации в ректификационных системах, разделяющих идеальные смеси // *ТОХТ.* 1977, т. 11, № 11. С. 598—605.
54. *Бояринов А. И.* Новые принципы расчета колонн ректификации и их комплексов: Автореф. дис. ... д-ра техн. наук. М.: МХТИ, 1972. 46 с.
55. *Щипин Ю. К., Ветозин В. И., Бояринов А. И., Кафаров В. В.* Автоматизированная система проектирования узла ректификации // *Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов и систем.* М.: МХТИ, 1975. Вып. 88. С. 43—53.
56. *Ветозин В. И., Чуунов А. М., Кафаров В. В.* Расчет ректификации многокомпонентных смесей с использованием метода квазилинеаризации // *Моделирование и оптимизация химико-технологических процессов и систем.* М.: МХТИ, 1975. Вып. 88. С. 61—66.
57. *Кафаров В. В., Ветозин В. И., Чуунов А. М.* Новый метод проектного расчета ректификационной установки // *Докл. АН СССР.* 1979. Т. 246, № 1. С. 160—163.

- Кафаров В. В., Бояринов А. И., Ветозин В. Ш., Новиков А. И. Моделирование ректификационных установок в системе автоматизированного проектирования ХТС // Нефтепереработка и нефтехимия. ВНИИ-Нефть, 1975. Вып. 9. С. 81—103.
- Каталов А. И., Мазеев В. П., Морозов Г. А. Алгоритм моделирования на ЦВМ процесса ректификации многокомпонентных неидеальных смесей в сложных колоннах // Автоматизация и КИП в нефтеперерабатывающей промышленности. 1979. № 5. С. 2—5.
- Huber J. W. F. Figure staged process by matrix // Hydrocarbon Process. 1977. Vol. 56, N 8. P. 121—125.
- Александров И. А. Массопередача при ректификации и абсорбции многокомпонентных смесей. Л.: Химия, 1975. 320 с.
- Кузнециков В. А., Константинов Е. Н., Серафимов Л. А. Сравнение методов описания массообмена в многокомпонентных смесях // Инж.-физ. журн. 1977. Т. 32, № 4. С. 615—619.
- Малоканов Ю. К. Многокомпонентный массоперенос на барботажных тарелках при перемешивании жидкости по диффузионному механизму // ТОХТ. 1978. Т. 12, № 4. С. 595—597.
- Кафаров В. В. Основы массопередачи. М.: Высш. шк., 1972. 496 с.
- Toor H. L. Solution of the linearised equation of multicomponent mass transfer // AIChE Journal. 1964. Vol. 10, N 4. P. 460—469.
- Standart G. L., Krishna R. A. A note on multicomponent mass transfer in turbulent flow // Lett. Heat and Mass Transfer. 1979. Vol. 6, N 1. P. 35—43.
- Krishna R. A. Penetration depths in multicomponent mass transfer // Chem. Eng. Sci. 1978. Vol. 33, N 11. P. 1495—1497.
- Medina A. G., McDermott G., Ashton N. Surface tension effects in binary and multicomponent distillation // Ibid. P. 1489—1493.
- Шпорин В. И., Константинов Е. Н., Николаев А. М. Массопередача при ректификации многокомпонентных смесей // ТОХТ. 1968. Т. 2, N 4. С. 505—507.
- Krishna R. E. Simplified film model description of multicomponent interface mass transfer // Chem. Eng. Sci. 1979. Vol. 3, N 1. P. 29—30.
- Кафаров В. В., Бояринов А. И., Ветозин В. Ш. Метод математического моделирования в процессах ректификации // ТОХТ. 1967. Т. 1, № 1. С. 47—72.
- Кафаров В. В., Бояринов А. И., Ветозин В. Ш. К расчету ректификационных колонн для разделения многокомпонентных смесей с учетом эффективности тарелок // ТОХТ. 1967. Т. 1, № 2. С. 237—242.
- Малюков В. А., Лотзов В. А., Бычков Е. В., Жаворонков Н. М. Тепло-массообмен в процессе ректификации. // ТОХТ. 1975. Т. 9, № 1. С. 3—9.
- Дорогов И. И., Семенов Г. И. Исследование кинетики массопередачи процесса ректификации // Теа. докл. IV Всесоюз. конф. по ректификации. Уфа, 1978. С. 122—127.
- Константинов Е. Н. Исследование диффузии и тепломассообмена в МКС в приложении к математическому моделированию процессов химической технологии. Автореф. дис. ... д-ра техн. наук. М.: МХТИ, 1975. 42 с.
- Bohm H. J. The simulation of steady state behaviour of the dephlegmation of multicomponent mixed vapor // Intern. J. Heat and Mass Transfer. 1980. Vol. 23, N 2. P. 141—146.
- Кафаров В. В., Бояринов А. И., Ветозин В. Ш. Разделительная способность тарелок в колоннах многокомпонентной ректификации // Докл. АН СССР. 1972. Т. 202, № 5. С. 1143—1146.
- Delancy G. B. Multicomponent film-penetration theory with linearization kinetics. I: Linearization theory and flux expression // Chem. Eng. Sci. 1974. Vol. 29. P. 2315—2323.

79. Бриль Ж. А., Мозжухин А. С., Петлюк Ф. В., Серафимов Л. А. Математическое моделирование и исследование процесса гетероазеотропной ректификации // ТОХТ. 1975. Т. 9, № 6. С. 811—821.
80. Rasmussen B. A., Seader J. B. Simulation of three phase distillation towers // Comp. and Chem. Eng. 1981. Vol. 5, N 1. P. 7—20.
81. Кафаров В. В., Ветозин В. П., Глебов М. Б. Математическая модель ректификации расслаивающихся смесей с рециклом и отбором фаз по высоте колонны // Докл. АН СССР. 1982. Т. 265, № 6. С. 1448—1451.
82. Hofeling B. S., Seader J. D. A modified naphtall-sandholin method for general system of interlinked maltstaged separator // AIChE Journal. 1978. Vol. 24, N 6. P. 1131—1134.
83. Серафимов Л. А., Балашов М. П., Астарита Д. Т. Массопередача с химической реакцией. Л.: Химия, 1971. Гл. 17. 223 с.
84. Патласов В. П., Балашов М. П., Серафимов Л. А. Анализ статистики непрерывных совмещенных реакционно-ректификационных процессов с помощью ЭВМ // ТОХТ 1980. Т. 14, № 1. С. 72—77.
85. Izarragaz A., Benston G. W., Anthony R. G., Holland C. D. Solve more distillation problem. Pt 9: When chemical reaction occurs // Hydrocarbon Process. 1980. Vol. 55, N 4. P. 195—203.
86. Бондарь Е. А., Ветозин В. П., Слюсарев В. А., Черновский А. Я. Математическая модель совмещенного реакционно-ректификационного процесса. М.: 1981. Деп. в ВНИИТИ, деп. рук. № 8, 6/о 428. 5 с.
87. Sugie H., Saito H., Adachi Y. Improvement of the relaxation method for multicomponent distillation // Bull. Nagoya Inst. Technol. 1978. Vol. 30. P. 433—439.
88. Кафаров В. В., Ветозин В. П., Потапов В. П. Декомпозиционный метод расчета технологических схем выделения целевых продуктов // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 1984. Т. 27, вып. 4. С. 470—474.
89. Hwang S.-T., Yuen K. H., Thorman J. M. Gas separation by a continuous membrane column // Separ. Sci. and Technol. 1980. Vol. 15, N 4. P. 1069—1090.
90. Киселев Ю. И., Караченцев В. Г., Гурьев А. В. и др. Моделирование одноступенчатого процесса мембранного разделения многокомпонентных газовых смесей // ТОХТ. 1984. Т. 18, № 3. С. 323—327.
91. Проектирование и оптимизация теплообменных аппаратов на ЭЦВМ. Ч.2/Под ред. Г. Е. Каневца. Киев: Наук. думка, 1970. 234 с.
92. Хоблер Т. Теплоотдача и теплообменники. Л.: Химия, 1961. 369 с.
93. Маньковский О. П. Теплообменная аппаратура химических производств. Л.: Химия, 1976. 364 с.
94. Distefano G. P. Stability of numerical integrations techniques // AIChE Journal. 1968. Vol. 14, N 6. P. 946—955.
95. Ракитский Ю. В., Устинов С. М., Черноуцкий И. Г. Численные методы решения жестких систем. М.: Наука, 1979. 208 с.
96. Ветозин В. П., Рожков А. М. Сравнение различных методов расчета периодической ректификации многокомпонентных смесей. Деп. в ВНИИТИ, 1982, № 9561—82, 7 с.
97. Кафаров В. В., Ветозин В. П., Рожков А. М. Исследование неявного метода интегрирования для расчета процесса периодической ректификации многокомпонентных смесей // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 1982. Т. 26, № 10. С. 1265—1269.
98. Кафаров В. В., Ветозин В. П., Рожков А. М. Оптимальное управление периодической ректификацией // Докл. АН СССР. 1982. Т. 267, № 4. С. 881—884.
99. Соболев И. М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973. 307 с.
100. Соболев И. М., Статников Р. Б. Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями. М.: Наука, 1981. 111 с.
101. Ветозин В. П., Потапов В. П. Декомпозиционный метод расчета сложных ректификационных систем // Моделирование процессов ректификации

- ции для целей оптимального проектирования производств нефтепереработки и нефтехимии. М.: ЦНИИНефтехим, 1981. С. 178—184.
102. Rodriguez L. Calculation of available energy quantities // Thermodynamics: Second law analysis. 1980. P. 15—38. (ACS Symp. Ser.; N 122).
103. Бродянский В. М., Семенов А. М. Термодинамические основы криогенной техники. М.: Энергия, 1980. 448 с.
104. Ec-Sayed Y. M., Evans B. V. Thermodynamics and the design of heat system // J. Eng. Power. 1970. Vol. 92. P. 27—35.
105. Бродянский В. М. Эксергетический метод термодинамического анализа. М.: Энергия, 1973. 296 с.
106. Цылин С. В., Бобров Д. А. Термодинамическая оптимизация тепловых энерготехнологических систем // Тез. докл. Всесоюз. конф. по методам кибернетики химико-технологических процессов. М.: МХТИ, 1984. С. 107.
107. Рид Р., Прауэниц Дж., Шерауд Т. Свойства газов и жидкостей. Л.: Химия, 1982. 592 с.
108. Evans L. V., Boston J. F., Britt H. I. et al. ASPEN: An advanced system for process engineering // Comp. and Chem. Eng. 1979. Vol. 3. P. 319—327.
109. Мацука Х. Комплексная система содействия проектной деятельности // Нихон кикай гаккай си. 1976. Т. 79, № 692. С. 673—679.
110. Атназарова С. Л., Кафаров В. В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. М.: Химия, 1985. 320 с.
111. Trevino-Lozano B. A., Kistala T. R. A simplified absorber model for nonlinear simultaneous modular flowsheet calculations // Comp. and Chem. Eng. 1984. Vol. 8, N 2. P. 105—115.
112. Chmowitz E. H., Macchietto S., Anderson T. F., Stutzman L. F. Local model for representing phase equilibria in multicomponent, nonideal vapor-liquid and liquid-liquid systems. 2: Application of process design // Ind. and Eng. Chem. Process Des. and Develop. 1984. Vol. 23, N3. P. 609—618.

Глава 8

АВТОМАТИЗИРОВАННЫЙ СИНТЕЗ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ СХЕМЫ ХИМИЧЕСКОГО ПРОИЗВОДСТВА

Конечной целью процесса проектирования, в том числе и автоматизированного, является разработка технологической схемы производства, обеспечивающей заданные качества продуктов. Поскольку речь идет не о получении продуктов любой ценой, а исходя из требований по энергетике, расходным коэффициентам и так далее, т. е. в соответствии с некоторым критерием, то технологическая схема должна быть оптимальной в смысле выбранного критерия. Оптимальность принимаемых решений на каждом этапе проектирования зависит от многих факторов, прежде всего от точности используемых моделей единиц оборудования, от возможности выбора среди множества реализаций оптимального производства или близкого к оптимальному. Ввиду комбинаторной

природы этой задачи выбор оптимального варианта технологической схемы невозможен без использования вычислительной техники (например, количество вариантов схем разделения многокомпонентных смесей с ростом числа компонентов смеси увеличивается по экспоненте).

Разработка — с и н т е з технологической схемы производства заключается в установлении оптимальной взаимосвязи между отдельными процессами, а также в оптимальном выборе типа и оптимальном проектировании этих процессов и обычно осуществляется в несколько этапов: а) определение функций химического производства (сырья, производительности, продуктов, рынков потребления и т. д.); б) определение критерия функционирования производства; в) выбор способов реализации функций химического производства (получения продуктов, их выделения, организации теплообмена и т. д.); г) декомпозиция проблемы на ряд взаимосвязанных подпроблем (реакторный узел, узел выделения продуктов и т. д.); д) реализация подпроблем в рамках принятых технологических решений [1].

По существу, выделенные этапы синтеза технологической схемы составляют иерархию принятия решений и являются следствием применения принципов системного подхода. Не все из этапов поддаются строгой математической формализации, вследствие чего решение проблемы синтеза наиболее целесообразно вести в режиме активного диалога с возможной коррекцией каждого этапа. Декомпозиция же проблемы не только упрощает общую задачу и существенно снижает требования к вычислительной технике по объему памяти и быстродействию, но и позволяет выделить в рамках синтеза технологической схемы производства отдельные подзадачи, а именно: синтез схем химического превращения, синтез схем выделения продуктов, синтез схем теплообмена, синтез систем управления.

Выделенные подзадачи достаточно общие, однако если исходить из условия взаимосвязи по материальным, энергетическим, информационным потокам, то они достаточно адекватно представляют проблему синтеза схемы производства в целом.

8.1. Методы синтеза технологической схемы

Как уже отмечалось, основная проблема синтеза технологической схемы заключается в многовариантности решений и, следовательно, в трудности выбора среди них оптимального. Многовариантность задачи синтеза наглядно иллюстрируется на примере разделения многокомпонентных смесей. Так, число вариантов схем при разделении N -компонентной смеси на N чистых продуктов M способами выражается формулой

$$K = \frac{2(N-1)!}{N!(N-1)!} M^{N-1},$$

Предполагается, что каждая колонна (аппарат) имеет два выходных потока, и каждый компонент может присутствовать в одном потоке. Размерность задачи с ростом N и M иллюстрируется данными табл. 8.1.

Таблица 8.1

Число компонентов N	Число методов M	Число вариантов K	Число компонентов N	Число методов M	Число вариантов K
3	1	2	5	3	1 134
3	2	8	9	5	558 593 750
5	1	14			

Ясно, что поиск оптимального решения простым перебором вариантов даже на мощных ЭВМ практически невозможен. Поэтому основное внимание при разработке методов синтеза уделяется проблеме исключения комбинаторной природы задачи, т. е. снижению размерности ее без потери оптимального варианта.

Известно большое число методов синтеза, особенно схем разделения многокомпонентных смесей и теплообменных систем, основанных на различных вычислительных и других предпосылках. Все они по подходу к задаче синтеза могут быть разделены на два класса: синтез при известной исходной технологической схеме, синтез при отсутствии исходной технологической схемы [1].

В первом случае синтез ведется на основе некоторой известной технологической схемы с использованием либо эволюционной стратегии, либо стратегии структурной оптимизации. В любом случае эффективность решения в значительной степени зависит от начального приближения.

Методы на основе эволюционной стратегии. Они заключаются в применении ряда правил, выработанных заранее, к исходной схеме с целью ее усовершенствования. Этот процесс логически содержит последовательное чередование этапов синтеза, анализа, оценки проектного решения и оптимизации. Общая методология эволюционного синтеза технологической схемы обычно включает три подзадачи: синтез исходного варианта технологической схемы, выработку правил модификации схемы, выработку эволюционной стратегии.

Исходный вариант технологической схемы может быть получен любым более простым методом, например с помощью набора критериев. В качестве такого может использоваться известный прототип синтезируемого химического производства. При известном варианте схемы набор правил модификации определяет способы ее усовершенствования. Эти правила должны учитывать все возможные структурные изменения, способные привести к оптимальному варианту технологической схемы. Естественно,

они должны обладать определенными свойствами, например быть эффективными в смысле функции цели, гарантировать получение реализуемого варианта схемы и т. д. Применительно к конкретному приложению метода синтеза эти правила будут изменяться, отражая именно специфику решаемой задачи. Поэтому вырабатываются они чаще всего на основе опыта и интуиции проектировщика. Выработанная стратегия эволюции призвана обеспечить получение все улучшающейся последовательности схем и состоит в применении правил модификации в соответствии с принятой стратегией. Это может быть, например, выбор узких мест или наименее эффективного элемента (процесса), модификация выделенного элемента, применение известных эффективных разработок к отдельным стадиям производства и т. д.

Методы структурной оптимизации. Они предполагают на первом этапе определение способов реализации химического производства (выбор альтернативных способов ведения процесса на отдельных стадиях) и создание на их основе некоторой интегрально-гипотетической технологической схемы, включающей все возможные варианты распределения материальных и энергетических ресурсов. Оптимизация ведется по специально определенным структурным параметрам распределения потоков, значения которых обычно задаются в диапазоне от 0 до 1 и характеризуют разделение или разветвление некоторого выходного потока. Конечные значения параметров и определяют технологическую схему. Нулевые значения отдельных из них свидетельствуют об отсутствии соответствующей связи аппаратов. С математической точки зрения задача синтеза представляет собой решение систем нелинейных уравнений, соответствующих описанию отдельных элементов (подсистем), и уравнений, отражающих структурные взаимосвязи между этими элементами (подсистемами). Основными методами решения являются методы нелинейного программирования. В виду высокой размерности системы уравнений поиск оптимального решения (технологической схемы) представляет определенные трудности вследствие многоэкстремальности и нелинейности задачи.

Другой класс методов, более обширный, основан на поиске оптимальной структуры, как правило, в рамках определенной группы процессов. Сюда можно отнести эвристические методы, декомпозиционные методы; методы перебора вариантов схем и выбора оптимального в соответствии с некоторым критерием.

Исторически первые методы синтеза базировались на обобщении опыта эксплуатации действующих производств, учете особенностей протекания отдельных процессов, специфике взаимосвязей свойств смесей и процессов. Выявленные на этой основе правила эвристики — позволяют априори наметить рациональную последовательность поиска реализуемого варианта и исключить из рассмотрения заведомо неперспективные с практической точки

решения технологические схемы, т. е. сократить область поиска оптимального решения. Методы синтеза, в основе которых используются выработанные правила, носят название эвристических. Они получили достаточно широкое распространение, особенно в сочетании с математически более строгими методами.

Как уже отмечалось ранее, роль эвристик состоит в определении такого направления поиска оптимального решения среди множества вариантов схем, которое исключало бы заранее физически нереализуемые, а также заведомо неоптимальные варианты. Очевидно, это возможно, если выбранные эвристики непротиворечивы, действительно отражают закономерности процесса и имеют под собой теоретическую основу. Являясь по сути попыткой отражения интеллектуального процесса решения задач человеческим мозгом на основе накопленных знаний, эвристики по мере накопления наших знаний о процессе получают количественную формулировку, тем самым приобретая и качественно новые свойства.

Эвристические правила представляют собой выражение накопленного опыта относительно исследуемого объекта в форме заключений с высокой степенью вероятности правдоподобия и широко используются при построении самых различных алгоритмов (синтеза технологических схем, экспертных оценок надежности функционирования производств, прогнозирования событий, описания объекта и т. д.). В контексте алгоритма эвристика приводит к принятию определенного решения в зависимости от текущего состояния объекта. Поэтому в общем виде формализация эвристических знаний может быть отражена конструкцией типа

«Если [состояние системы i] & (эвристическое правило), тогда [состояние системы j];»

«Если [состояние системы i] & (результат наблюдения), тогда [состояние системы j].»

Здесь & — знак логического умножения. В последнем случае все выражение является эвристическим правилом.

В основе декомпозиционных методов лежит теория элементарной декомпозиции, определяющая принципы разделения исходной задачи синтеза на ряд более простых подзадач, для которых могут быть применены известные или достаточно легко получаемые определенные технологические решения, соответствующие современному уровню развития технологии. Решение задачи декомпозиции существенно упрощается, если выделенные элементы (подсистемы) имеют тривиальное решение (например, отдельный теплообменник, ректификационная колонна и т. д.). В противном случае оптимизация должна проводиться как на уровне отдельного элемента, так и системы в целом по уточнению взаимосвязей между ними. Рассмотрим систему, состоящую из двух взаимосвязанных элементов (рис. 8.1). Здесь M_1 , M_2 — переменные процесса, x_1 , x_2 — промежуточные потоки, передаваемые между подсистемами. Задача состоит в поиске оп-

тимума функции стоимости процесса по переменным (параметрам) M_1 и M_2 :

$$F = \min_{M_1, M_2} (f_1(M_1) + f_2(M_2)), \quad (8.1)$$

где f_1, f_2 — функции цели для подсистем. Связь между подсистемами устанавливается с помощью соотношений

$$\begin{aligned} x_{1i} &= x_{1i}(M_1, (x_{2j})), \quad (j = \overline{1, n_2}), \quad i = \overline{1, n_1}; \\ x_{2j} &= x_{2j}(M_2, (x_{1i})), \quad (i = \overline{1, n_1}), \quad j = \overline{1, n_2}. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Для поиска оптимума системы без использования декомпозиции размерность комбинаторной задачи будет определяться ве-

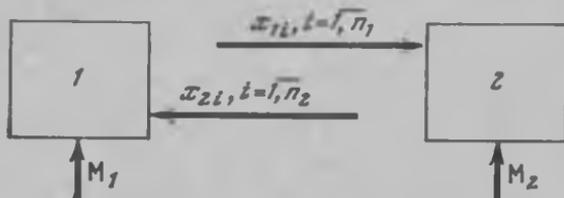


Рис. 8.1. Декомпозиция системы взаимосвязанных элементов.

торами M_1 и M_2 . Подсистемы будут независимыми, если каждому из потоков x сопоставить стоимость P [2]. Тогда задача оптимизации может быть поставлена как

$$\min_{M_1} (f_1(M_1) + \sum_{i=1}^{n_1} P_{1i}x_{1i} - \sum_{i=1}^{n_2} P_{2i}x_{2i}); \quad (8.3)$$

$$\min_{M_2} (f_2(M_2) + \sum_{i=1}^{n_2} P_{2i}x_{2i} - \sum_{i=1}^{n_1} P_{1i}x_{1i})$$

при условии, что

$$F = f_1 + f_2. \quad (8.4)$$

При правильном выборе вектора P оптимальные решения для каждой подсистемы будут определять и глобальный оптимум системы. Таким образом, задача состоит в том, чтобы задавать такие значения P , которые обеспечивают движение к оптимуму.

В методах перебора пространство поиска обычно представляется в виде древовидного графа, вершины которого соответствуют аппаратам, а дуги отражают их взаимосвязь в схеме. При этом каждая ветвь дерева представляет собой вариант технологической схемы. Задача синтеза заключается в том, чтобы, не перебирая все ветви дерева, найти схему, оптимальную в смысле некоторого критерия. С точки зрения анализа дерева вариантов методы, основанные на эвристических правилах, по существу «отрубают» некоторые из ветвей, тем самым снижая размерность поиска. Чем больше эвристика, тем меньше ветвей, среди которых производится поиск оптимального варианта схемы.

Выбор оптимального варианта технологической схемы можно осуществить в результате сравнительного анализа величины критерия различных схем. Целесообразно предположить, что имеется некоторое граничное значение критерия эффективности схемы (приведенные затраты, термоэкономические показатели и т. д.), выше (ниже) значения которого показатели синтезируемой схемы не могут быть. Методы синтеза с использованием граничных значений критерия эффективности составляют группу методов ветвей и границ. Использование границ при поиске на дереве вариантов позволяет, во-первых, существенно сократить пространство поиска вследствие того, что если значение критерия выходит за установленные пределы на любой стадии синтеза, то данный вариант исключается из дальнейшего рассмотрения (даже если он и не завершен), и, во-вторых, позволяет упорядочить процедуру перебора вариантов. Однако сложность применения этих методов состоит в том, что за редким исключением не удастся априори установить такие границы. Чаще всего они устанавливаются с помощью соответствующих эвристик или как результат сопоставительного анализа закона изменения критерия.

Возможны два алгоритма поиска оптимального варианта технологической схемы на дереве вариантов: «углубляющийся» и «расширяющийся» [3]. В обоих случаях вершины, соответствующие исходному или промежуточному узлу, рассматриваются как альтернативные с целью получения новой вершины, и этот процесс повторяется до тех пор, пока не будет получена «висячая» вершина, соответствующая завершенной технологической схеме.

Углубляющийся поиск состоит в том, что вершина, полученная последней, рассматривается первой на следующем этапе. Это означает, что анализ вершин ведется вдоль одной ветви схемы, пока не будет достигнута максимальная глубина (последняя вершина или вершина, для которой величина критерия оптимальности превосходит значение, полученное ранее при движении по другим ветвям). Затем рассматриваются альтернативные пути той же или меньшей глубины, которые отличаются последним шагом. После этого рассматриваются пути, отличающиеся последними двумя шагами, и т. д. Вид дерева вариантов при таком поиске приведен на рис. 8.2,а, где порядок приоритета исследования получаемых вершин обозначен цифрами. Легко заметить, что при некорректном расчете вершин (например, по упрощенным моделям) вероятность потери оптимального варианта высокая. Углубляющийся поиск характерен для методов ветвей и границ, когда граничная оценка делается на основании просмотра одной из ветвей дерева. Сюда же можно отнести и процедуру разветвляющегося направленного поиска [4].

Расширяющийся поиск состоит в том, что ветвление происходит по ширине на одном уровне. Переход на следующий уровень будет осуществлен лишь в том случае, если все верши-



Рис. 8.2. Пример стратегии поиска на дереве вариантов углубляющейся (а) и расширяющейся (б)

ны предыдущего уровня рассмотрены. На основе сравнения значений критерия на данном уровне возможен отсев (отсечение) отдельных ветвей. Такой поиск характерен для методов, основанных на динамическом программировании. Ясно, что при анализе вершин по упрощенным моделям здесь также высокая вероятность потери оптимального варианта. Вид дерева вариантов для расширяющегося поиска приведен на рис. 8.2, б.

Каждый из указанных методов синтеза имеет свои достоинства и недостатки. Поэтому развитие методов применительно к конкретным задачам синтеза обычно идет по пути создания комбинированных, объединяющих положительные свойства отдельных из них. Примерами этого служат такие методы, как эволюционный эвристический, декомпозиционно-эвристический, декомпозиционно-топологический и т. д. [5].

8.2. Синтез схем химического превращения

Методы, связанные с синтезом схем химического превращения, удобно разделить на две группы, а именно: выбор оптимального маршрута химического превращения с целью получения заданных продуктов, собственно синтез реакторного узла химического превращения.

В первом случае речь идет о получении новых продуктов (или известных более эффективными способами). Эта задача решается на основе знаний кинетики химических реакций, по существу на молекулярном уровне с последующим привлечением экспериментальных данных для определения параметров и дискриминации конкурирующих механизмов реакций. Задача синтеза реакторного узла в основном заключается в обеспечении оптимальных

условий промышленной эксплуатации за счет организации соответствующей гидродинамики потоков и энергетических потоков синтезируемой схемы.

Автоматизированный синтез маршрутов протекания химических реакций более всего развит применительно к органической химии. Известные подходы к решению этой проблемы можно отнести к двум типам: ассоциативному и логическому [1]. Первый основан на том, что маршруты строятся на основе известных реакций для отдельных стадий, а второй — на генерации промежуточных элементов, образующих дерево маршрутов получения целевых продуктов реакции. Различные ветви дерева являются альтернативными вариантами, которые будут отвергаться или приниматься пользователями. Известны практические реализации этих подходов в виде комплексов программ [6—9], отличающиеся способом представления молекул вещества и стратегией синтеза альтернативных маршрутов реакций.

Примером ассоциативного подхода к синтезу является комплекс программ LHASA [6]. Синтез проводится от целевого (целевых) продукта к исходным веществам. На каждой стадии синтеза отслеживаются по известным наборам реакций возможные исходные вещества. Этот процесс заканчивается, когда выявляются предшествующие стадии, которые являются относительно несложными с точки зрения практической реализации. Синтез ведется на основе 600 известных химических реакций, находящихся в БД системы. Эмпирический характер информации о реакциях лимитирует количество генерируемых вариантов, однако сама система позволяет все-таки исследовать всевозможные известные способы получения продуктов для выбора наиболее оптимального. В вычислительном плане система реализована для работы в интерактивном режиме, так что пользователь может активно вмешиваться в процесс синтеза.

Система, описанная в работе [6], является дальнейшим развитием предыдущей в том плане, что учитывается пространственное строение молекул. Как и ранее, синтез ведется от конца к началу (от продуктов реакции к исходным веществам) по заранее определенному набору химических реакций. Аналогичный подход использован в системе [10]. Более обоснованными и перспективными являются методы, основанные на математическом описании структуры молекул и химических реакций и классифицируемые как логические методы [8, 11]. В работе [8] для представления молекулы в качестве параметров используются тип атома и топологическая структура связей между атомами в молекуле. При этом акцент сделан на типы атомов углерода в молекуле в соответствии с характерной связью углерода с другими элементами. В работе [11] для характеристики молекулы используются три параметра: местоположение атома в молекуле, ковалентные связи между атомами и свободные электроны в каждом атоме молекулы. Послед-

		O	N	C	C	H	H	H
O	4	0	2	0	0	0	0	0
N	0	2	0	3	0	0	0	0
C	2	0	0	0	0	1	1	
-C	3	0	0	0	1	0	0	
H	0	0	0	1	0	0	0	
H	0	0	1	0	0	0	0	
H	0	0	1	0	0	0	0	
→		E						

Сумма элементов матрицы R равна нулю, поскольку

$$S = \sum_{ij} e_{ij} = \sum_{ij} b_{ij} + \sum r_{ij} = \sum b_{ij}.$$

Следовательно, среди ее элементов должны быть отрицательные, в преобразование $B + R = E$ будет в том случае химической реакцией, если выполняется условие $e_{ij} = b_{ij} + r_{ij} \geq 0, \forall i, j$.

Таким образом, для данного ансамбля молекул можно подобрать химические реакции и определить продукты реакции путем преобразования матрицы связей (перераспределения валентных электронов).

В общем случае матрица реакций может быть применена не к одной, а многим матрицам связей (многим наборам реагентов). Соответственно матрица реакции представляет собой не какую-либо отдельную реакцию, а целую категорию с общим законом перераспределения электронов, называемую R -категорией. Таким образом, R -категория представляет собой класс эквивалентных реакций с одинаковым законом переопределения электронов и одинаковым размещением участвующих связей. За некоторым исключением основные химические реакции в органической химии протекают при перераспределении электронов между атомами от одного до шести. В таких реакциях могут разрываться или образовываться до трех связей, в некоторых случаях сопровождаясь изменением эффективного заряда у одного атома на $+1$, а у другого на -1 . Такие реакции принадлежат к R -категории, матрицы реакций которых имеют до трех пар положительных или отрицательных недиагональных элементов $r_{ij} = r_{ji} = \pm 1$. Нулевые диагональные элементы $r_{ii} = \pm 2$, соответствующие радикальным (ионным) реакциям, размещаются таким образом, чтобы сумма элементов в строках (столбцах) матрицы была равна нулю, за исключением одной строки (столбца) со значением $r_i = \sum_j r_{ij} = \pm 1$.

Поэтому классификация и определение типа реакций имеют важнейшее значение при синтезе маршрутов химического превращения. В практической реализации рассмотренного подхода (сис-

тема СНИРП [13]) при формировании матриц реакций приняты следующие ограничения: матрица симметричная, диагональные элементы равны нулю, сумма элементов строки (столбца) равна нулю.

Поскольку недиагональные элементы характеризуют изменение связей между атомами, сумма положительных элементов равна сумме отрицательных элементов, т. е. число разорванных связей между атомами будет равно числу вновь образованных в результате протекания реакции. Матрица порядка $n \times n$ с такими свойствами имеет ранг $n(n-3)/2$ и соответственно столько же базисных реакций в семействе изомерных ансамблей реакций, другие реакции будут их линейной комбинацией. Отсюда следует, что наименьший порядок матрицы реакций равен 4.

Для описания R -категории реакций используется номенклатура в виде $RMMNI$, где M — число разрываемых (создаваемых) связей, N — число атомов, участвующих в реакции; I — индекс, обозначающий подкатегорию реакций.

Пусть имеются одновалентные атомы A , B , C и D . Тогда в соответствие с номенклатурой матрица реакции запишется как $R224$, поскольку при наличии четырех одновалентных атомов можно образовать только две связи. При этом матрица реакции будет обладать следующими свойствами: сумма двух прилежащих элементов не может превышать единицы, два прилежащих элемента не могут быть нулевыми.

Таким образом, между атомами могут быть установлены следующие взаимодействия: 1) $A - B$, $C - D$; 2) $A - C$, $B - D$; 3) $C - B$, $A - D$.

Для реакции $A - B + C - D \rightarrow A - D + B - C$ матрицы связей и реакции будут иметь вид

	A	B	C	D		A	B	C	D		A	B	C	D		
A	0	1	0	0	+	A	0	-1	0	1	-	A	0	0	0	1
B	1	0	0	0		B	-1	0	1	0		B	0	0	1	0
C	0	0	0	1		C	0	1	0	-1		C	0	1	0	0
D	0	0	1	0		D	1	0	-1	0		D	1	0	0	0

Если в матрице реакции поменять два столбца и две строки местами (например, C и B), не меняя меток, то будут получены другие продукты реакции, однако матрица реакции будет принадлежать той же категории. В данном примере N не может быть более четырех, поскольку число возможных связей равно двум.

В процессе синтеза химических соединений обычно ведется термодинамический анализ, па основе которого выбирается оптимальный вариант, а также идентификация продуктов реакции путем сопоставления их с веществами, представленными в каталоге системы.

Синтез схем химического превращения на основе стехиометрического анализа реакционной системы. Проведение химических реакций в лабораторных условиях или на пилотных установках на стадии исследования обычно не дает однозначного ответа на вопрос о механизме протекания реакций, а чаще всего позволяет лишь выявить систему конкурирующих гипотез. Поэтому важнейшим этапом является получение надежных кинетических моделей, правильно отражающих структуру химических превращений и основные динамические свойства рассматриваемой химической системы. В основе метода дискриминации кинетических моделей (выбора наиболее вероятного механизма, оценки числа независимых реакций и компонентов) лежит использование понятий структурных и молекулярных видов [14, 15].

Структурными видами M_i^A ($i = 1, 2, \dots, M$) в заданном множестве химических реакций называют осколки молекул, радикалы, ионы, электроны и так далее, т. е. части реагентов, которые не претерпевают дальнейших превращений в рассматриваемой системе. Каждый химический реагент, называемый молекулярным видом M_i^B ($i = 1, 2, \dots, N$), может быть представлен в виде конечной линейной комбинации структурных видов

$$M_i^B = \sum_{j=1}^M \alpha_{ij} M_j^A, \quad (8.10)$$

где α_{ij} — целые числа, определяющие количество структурных видов в молекулярных. Матрица $A = \{\alpha_{ij}\}$ называется структурной матрицей. Среди основных свойств транспонированной структурной матрицы A^T следует отметить отсутствие нулевых столбцов (не допускается существование тривиальных молекулярных видов) и нулевых строк (неверный выбор структурных видов).

Используя понятие молекулярного вида (8.10), любую химическую реакцию можно представить в виде линейного функционала

$$R_r = \sum_{i=1}^N \beta_{ri} M_i^B, \quad r = 1, 2, \dots, L, \quad (8.11)$$

где β_{ri} — стехиометрические коэффициенты (положительные рациональные числа для продуктов реакции и отрицательные — для исходных реагентов). В матричном виде соотношение (8.11) запишется как

$$R = BM^B, \quad (8.12)$$

где B — матрица стехиометрических коэффициентов, размерности $L \times N$.

Итак, каждому молекулярному виду ставится в соответствие M -мерный вектор a_k ($k = 1, 2, \dots, N$) структурной матрицы A ,

а каждой химической реакции — N -мерный вектор β_k ($k = 1, 2, \dots, L$) матрицы стехиометрических коэффициентов. Фундаментальные законы (например, сохранения массы, электронейтральности конденсированных систем и т. д.) накладывают вполне определенные ограничения на векторы a_k и β_k , поэтому общее число независимых векторов (т. е. независимых химических реакций) не может быть равно числу векторов базиса a_k . Оценка числа независимых реакций имеет важное значение при анализе механизма химических реакций, поскольку дает возможность строить все возможные элементарные химические реакции (которые протекают или могут протекать в анализируемой системе) путем комбинации независимых векторов.

Среди всех возможных реакций лишь часть отвечает закону сохранения массы. Такие реакции называются собственными, и условием их существования является равенство нулю выражения (8.11), т. е.

$$R_r = \sum_{i=1}^N \beta_{ri} M_i^b = 0, \quad (8.13)$$

а число независимых реакций в множестве $\{R_r\}$ определяется рангом стехиометрической матрицы B . Условие (8.13) можно представить иначе, если подставить в него выражение для молекулярного вида (8.10). Тогда можно записать

$$\sum_{i=1}^N \beta_{ri} \alpha_{ij} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, M; \quad r = 1, 2, \dots, L, \quad (8.14)$$

или

$$B \cdot A = 0. \quad (8.15)$$

Система линейных однородных уравнений имеет бесконечное число решений и выделить их, вообще говоря, не представляется возможным. Большой интерес представляет установление числа независимых решений (химических реакций), чтобы построить полную систему конкурирующих механизмов сложной реакции. Число независимых реакций определяется в соответствии с обобщенным стехиометрическим правилом Гиббса, а именно $z = \bar{N} - \text{rang}(A^*)$, т. е. число независимых химических реакций равно разности между числом молекулярных видов и рангом структурной матрицы A . Таким образом, для определения числа независимых реакций необходимо определить ранг матрицы структурных видов (порядок наибольшего не равного нулю минора) и после выбора независимых вектор-столбцов матрицы A воспользоваться уравнением (8.14).

Обычно в пределах гипотезы о схеме механизма протекания химической реакции известны реагенты (виды атомов, радикалов и т. д.), поэтому практически всегда имеется возможность постро-

ения структурной матрицы A . Однако правило Гиббса позволяет установить число стехиометрически независимых реакций. Теперь, если воспользоваться соотношением (8.15), можно получить соответствующие стехиометрические уравнения для этих реакций с точностью до их линейной комбинации (стехиометрическую матрицу B). Вообще говоря, строго установить вид стехиометрической матрицы B нельзя, поскольку все решения уравнения (8.15) являются эквивалентными. Однако, принимая во внимание фундаментальные суждения о структуре химических реакций (например, предельные значения стехиометрических коэффициентов, минимальное число реагентов химической реакции и т. д.), можно сделать предварительные ограничения относительно структуры этой матрицы. Поиск матрицы B с числом стехиометрически независимых реакций, равным z , может быть осуществлен в результате решения системы уравнений (8.15), представленной в виде

$$\sum_{i=1}^{r(A)} \beta_{ri} \alpha_{ij} = - \sum_{i=r(A)+1}^N b_{ri} \alpha_{ij}, \quad r = 1, 2, \dots, z; \quad j = 1, 2, \dots, r(A), \quad (8.16)$$

где β_{ri} — искомые независимые переменные; $r(A)$ — ранг матрицы A ; b_{ri} — произвольно задаваемые значения свободных переменных, выбираемые следующим образом:

$$b_{ri} = \begin{cases} 1 & \text{при } i = r(A) + r; \\ 0 & \text{при } i \neq r(A) + r. \end{cases} \quad (8.17)$$

Система (8.16) получается в результате выбора в структурной матрице A адекватной невырожденной подматрицы (определитель которой отличен от нуля) и перенумерации строк и столбцов матриц A и B таким образом, чтобы индексы пробегали значения от единицы до $r(A)$. Для нахождения всех стехиометрически простых решений необходимо определить базисные решения для каждой невырожденной подматрицы матрицы A порядка $r(A)$. Нетрудно заметить, что для различных r (независимых реакций) в системе (8.16) изменяется лишь правая часть, что облегчает процедуру решения систем линейных алгебраических уравнений для различных подматриц. В процессе синтеза может оказаться, что некоторые получаемые реакции химически неправдоподобны. Естественно, что такие необходимо исключать на всех этапах.

Рассмотренные подходы методологически во многих аспектах сложны и в рамках известных химических реакций достаточно легко реализуются. Если же говорить о синтезе новых химических продуктов, то выбор стратегии поиска, отсев неэффективных или абсурдных решений должен проводиться на основе фундаментальных закономерностей химических процессов, на основе результатов оптимизации по некоторому критерию. Размерность задачи синтеза слишком большая. Поэтому нужны «рабочие» эв-

ристики, которые позволяли бы в конкретных случаях упростить задачу без потери точности решения. Естественно, последние должны базироваться как на теоретических предпосылках, так и отдельных аспектах промышленной реализации.

Синтез реакторных систем. В практике исследований синтез реакторных систем в основном ограничивается вопросами распределения нагрузок на параллельно работающие системы, распределения времени пребывания в каскадах реакторов и как самостоятельная проблема не получила достаточного развития. Большое число оптимизационных задач химических реакторов решается для исследования распределения температур, времени пребывания, старения катализатора, его регенерации и так далее, т. е. частным вопросам повышения эффективности единичных реакторов. Большое внимание уделяется также исследованию гидродинамической структуры потоков одно- и многофазных реакторов. Вместе с тем стадия химического превращения является лишь частью химического производства и связана по крайней мере материальными потоками с другими стадиями. Подход, используемый при оптимизации технологической схемы на основе аддитивности критерия, не может обеспечить глобального оптимума. Большой интерес с точки зрения интегрального подхода к синтезу технологической схемы представляют реакторы с рециклами, с тепловым объединением. Очевидно, решение этих задач следует проводить совместно с синтезом схем химического превращения, так же как и с последующей стадией — выделением продуктов реакции.

8.3. Синтез теплообменных систем

Проблема синтеза теплообменной системы состоит в определении поверхности теплообмена и поиске такого способа соединения теплообменников, при котором попарное взаимодействие потоков (теплоносителей и хладагентов) обеспечивает оптимальное значение критерия функционирования всей системы (обычно экономического). Однородность элементов системы, легкость формулирования и относительная простота задачи привлекают внимание многих исследователей к разработке алгоритмов автоматизированного синтеза технологических схем теплообмена. Однако, несмотря на кажущуюся простоту, комбинаторная природа задачи приводит к значительным трудностям вычислительного характера. Поэтому все известные методы синтеза (а их известно уже большое количество) отличаются главным образом способами снижения размерности задачи. Примечательно, что большинство алгоритмов синтеза технологических схем своим появлением обязано теплообменным системам.

Обычно при постановке задачи синтеза теплообменных систем известными характеристиками являются число и параметры «го-

ричных» и «холодных» потоков (расход, начальные и желаемые конечные температуры, давление, теплофизические и физико-химические свойства потоков), тип аппаратов, стоимостные параметры оборудования и теплохладоагентов. В результате синтеза необходимо определить структуру связей между аппаратами с целью рекуперации тепловой энергии, конструкционные характеристики оборудования при оптимуме некоторого критерия, например при минимуме приведенных затрат на создание (реконструкцию) и эксплуатацию системы.

При математической формулировке задачи в первую очередь выделяется совокупность параметров состояния синтезируемой системы, однозначно определяющих все остальные параметры системы и ее элементов, в том числе и критерия оптимальности. Формулирование задачи, очевидно, проводится с ориентацией на определенный алгоритм синтеза, в связи с чем принимаются и соответствующие ограничения. Технологические схемы теплообменных систем могут отличаться типом функциональных элементов, т. е. теплообменных аппаратов (вектор T), конструктивными характеристиками элементов (вектор K) и схемой соединения элементов (множество структур G). Часть параметров состояния при проектировании обычно определяется техническим заданием (например, группа типов теплообменников T) или регламентируется действующими стандартами на теплообменное оборудование (вектор K). К независимым параметрам состояния теплообменной системы также относится вектор параметров исходных технологических потоков (X). Что касается параметров выходных потоков (вектор Y), то для них обычно задается совокупность функций ограничения типа $T_{\min} \leq T \leq T_{\max}$, или $P \geq P_{(\min)\max}$.

Следует заметить, что часть эксплуатационных, технологических и других требований технического задания на разработку теплообменной системы не поддается формализации и не может быть включена в систему ограничений. К ним относятся, например, сложившиеся внутризаводские технологические связи конкретного производства, условия размещения оборудования в объеме площадки. Учет таких ограничений производится проектировщиками в процессе анализа теплообменных систем, полученных в результате синтеза.

Потоки внутри теплообменной системы, называемые промежуточными, составляют множество P . Промежуточный поток, определяемый как исходный поток в некотором стационарном состоянии между двумя последовательными операциями теплообмена, будет иметь параметры, зависящие от конкретных условий взаимодействия и возможностей используемых теплообменников. Число параметров потоков зависят от количества и параметров теплообменников системы: чем больше число теплообменников, тем больше размерность задачи синтеза.

Таким образом, синтез теплообменной системы заключается в выборе такой схемы соединения теплообменных аппаратов чтобы обеспечивался оптимум критерия Π :

$$\Pi = \underset{G, P, T, K}{\text{opt}} \Pi(X, T, G, Y, K, P). \quad (8.10)$$

В соответствии с постановкой задачи синтеза теплообменной системы и математической формулировкой T , K и Y являются заданными величинами. Поэтому при синтезе тепловой системы требуется получить такой вариант технологической схемы G чтобы

$$\Pi(G^*, P^*) = \min_{G, P} \Pi(G, P), \quad G^* \in G. \quad (8.11)$$

Важным этапом в постановке задачи синтеза является выбор критерия оптимальности технологической схемы теплообменной системы. В качестве такого обычно принимается величина приведенных затрат на строительство и эксплуатацию системы. Способом формирования такого критерия является аддитивный учет факторов, определяющих затраты на изготовление и монтаж оборудования, а также затраты на эксплуатацию системы в течение определенного периода времени, включая стоимость энергии. Приведенные затраты, связанные со строительством и эксплуатацией теплообменной системы, могут быть выражены следующим образом [5, 16]:

$$\Pi = (\delta_{\text{ок}} + \delta_{\text{ам}}) \left(\sum_i \Pi_i + \sum_i \Pi_i^* \right) + \theta \sum_k \sum_i C_k^{**} C_{ki}, \quad (8.20)$$

где $\delta_{\text{ок}}$ — нормативный коэффициент окупаемости, год⁻¹; $\delta_{\text{ам}}$ — норма амортизации, год⁻¹; Π_i — стоимость i -го основного реперативного теплообменника, руб; Π_i^* — стоимость i -го вспомогательного теплообменника (нагревателя или холодильника) руб.; C_k^{**} — стоимость k -го вспомогательного тепло- или хладагента, руб. кг; C_{ki} — массовый расход k -го теплоносителя в i -м вспомогательном теплообменнике, кг/ч; θ — продолжительность годовой эксплуатации оборудования системы, ч/год.

Другим способом оценки эффективности теплообменной системы является использование термозкономического (4.37), эксергетического КПД (4.33) при оценке потерь эксергии системы в предположении постоянства теплоемкостей потоков [16]:

$$\sum_i \sum_k \Delta E_{ik} = T_0 \left(\sum_j \omega_j c_j \ln \frac{t_j}{t_{ji}} + \sum_k W_k C_k \ln \frac{T_{ki}}{T_{ki}'} \right), \quad (8.21)$$

где C_k , c_j — удельная теплоемкость, Дж/(кг·К); W_k , ω_j — массовый расход потоков, кг/ч; T_0 — температура окружающей среды, К; T_{ki} , t_{ji} — входная температура, К; T_{ki}' , t_{ji}' — выходная температура, К; j — сток тепла; k — источник тепла.

Задача синтеза теплообменной системы в соответствии с критерием (8.18) и даже (8.19) представляется чрезвычайно многомерной. Поэтому в алгоритмах синтеза принимаются упрощающие допущения, позволяющие снизить ее размерность. К таким допущениям обычно относятся следующие: в пределах технологической схемы два потока обмениваются теплом только однажды (т. е. отсутствуют циклические структуры); потоки в пределах системы выступают как единое целое (не допускается расщепление потоков); допустимая разность температур между потоками для всех теплообменников одинаковая.

Возвращаясь к критерию (8.19), следует обратить внимание на факторы, которые обеспечивают минимум приведенных затрат на создание и эксплуатацию системы. Прежде всего это подвод энергии внешних источников (тепла или холода) для доведения параметров выходных потоков до предписанных значений. При одновременном синтезе всей технологической схемы эта проблема может и не возникнуть, так как внешними источниками и стоками энергии тепловой системы могут быть другие системы производства (реакторная, разделения и т. д.), т. е. рекуперация энергии будет осуществляться в масштабах всего производства. Если тепловую систему рассматривать отдельно, то необходимы дополнительные затраты на компенсацию несоответствия параметров выходных потоков заданным значениям. При синтезе системы теплообмена желательно, чтобы эти затраты были хотя бы минимальными. Оценка минимального потребляемого количества внешней энергии может быть произведена с помощью диаграмм температура — тепловая нагрузка [16]. Для этого в координатах T, Q для объединенных холодного и горячего потоков строятся зависимости $T = f(Q)$ и совмещением последних до разности температур по вертикали, равной ΔT_{\min} (перемещая один график относительно другого по оси абсцисс), определяется температурный (соответственно и по тепловой нагрузке) интервал, который не может быть компенсирован в результате взаимодействия этих потоков (рис. 8.3). Это несоответствие параметров потоков должно компенсироваться за счет внешних источников тепла.

Другим фактором, определяющим капитальные затраты на создание системы, является минимум числа теплообменников (минимальное число промежуточных потоков). Минимальное число теплообменников в системе на единицу меньше числа потоков, включая внешние [17]. Для выполнения этого условия необходимо, чтобы в результате выполнения операции теплообмена один из потоков достигал конечных значений параметров. Для иллюстрации на рис. 8.4 приведена система, содержащая два горячих и два холодных потока. Числа в кружках соответствуют количеству единиц тепла, которое необходимо передать (принять) в результате теплообмена, а числа вдоль дуг — количество единиц передаваемого тепла. Для синтезированной тепловой системы, очевидно,

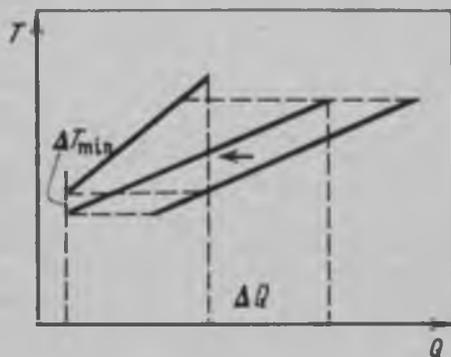


Рис. 8.3. Определение потребности во внешних источниках тепла

должны выполняться уравнения теплового баланса, т. е. количества передаваемого и принимаемого тепла должны быть равны. Если же для обменивающихся теплом потоков (холодных и горячих) это равенство не соблюдается, то необходимо в систему включить некоторый внешний источник.

Так, для схемы на рис. 8.4 для нагрева холодных потоков до заданных температур необходимо 410 единиц тепла, в то время как горячие потоки содержат 250 единиц и не могут обеспечить требуемое условие даже при полной рекуперации. В связи с этим в систему включается внешний источник мощностью 160 единиц тепла. Естественно, взаимодействующие потоки должны иметь соответствующие температуры.

С минимальным числом теплообменников непосредственно связан еще один фактор, характеризующий эффективность теплообменной системы. Это минимум поверхности теплообмена. Оценка последнего, как и двух предыдущих, может быть произведена по

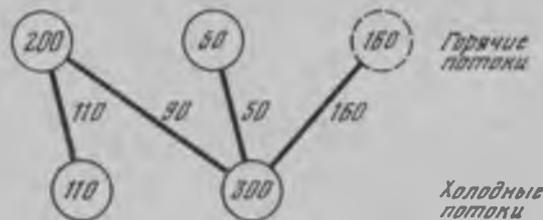


Рис. 8.4. Оценка минимального числа теплообменников в системе с четырьмя потоками

обобщенным тепловым потокам системы при допущении постоянства коэффициента теплопередачи в соответствии с формулой

$$A = \frac{1}{K} \int \frac{dQ}{\Delta T}, \quad (8.22)$$

где A — поверхность теплообмена; K — коэффициент теплопередачи; ΔT — разность температур (расстояние между графиками $T = f(Q)$ по вертикали, см. рис. 8.4); Q — количество передаваемого тепла.

При синтезе теплообменных систем оценка указанных факторов, выполняемая предварительно, позволяет уже получить некоторые количественные характеристики будущей системы.

Информация, полученная на этапе предварительного анализа задачи разработки теплообменной системы, может служить опорными точками при выполнении непосредственно этапа синтеза. Стратегия же получения оптимального варианта технологической системы полностью определяется используемым алгоритмом.

Известные алгоритмы синтеза теплообменных систем отличаются большим разнообразием. Итак, все перечисленные подходы к синтезу технологических схем реализованы применительно к теплообменным системам. Имея, по существу, одинаковыми исходные данные на проектирование и конечную цель, алгоритмы синтеза различаются способами формирования структуры системы и ее модификации. В соответствии с этим все алгоритмы можно разделить на две группы — с последовательной и одновременной генерацией топологии системы, т. е. при отсутствии или наличии исходной топологии [1]. Хотя такая классификация и не является абсолютной (многие методы обладают признаками обоих подходов), все же она дает возможность делать некоторые обобщения.

Для алгоритмов первой группы принципиальным вопросом является выбор стратегии поиска последующих операций теплообмена. Здесь наиболее распространенными методами являются эвристический, ветвей и границ, прямого перебора.

Эвристический метод в классическом виде редко используется, однако эвристические приемы для сокращения пространства поиска оптимального варианта при прямом переборе или в методе ветвей и границ применяются практически всегда. К таким эвристическим правилам обычно относятся следующие.

1. Теплообмен осуществляется между горячим и холодным потоками, для которых имеет место

$$t_i^n = \max_k t_k^n, \quad i = 1, 2, \dots, N; \quad (8.23)$$

$$t_j^n = \max_k t_k^n, \quad j = 1, 2, \dots, M,$$

где i — горячий поток; j — холодный поток; $t_{i,j}^n$ — начальная (выходная) температура потока i (j).

2. Теплообмен осуществляется между горячим и холодным потоками, для которых справедливо

$$t_i^n = \min_l t_l^n; \quad (8.24)$$

$$t_j^n = \min_l t_l^n.$$

3. Теплообмен осуществляется между горячим и холодным потоками, для которых справедливо

$$\Delta t = \min_{i,j} \Delta t, \quad (8.25)$$

где Δt — разность температур.

4. Теплообмен осуществляется между входными потоками, для которых

$$P_{ij} = \min_l P_{(ij)l}, \quad l \in (i, j), \quad (8.26)$$

где P_{ij} — приведенные затраты на проведение операции теплообмена. Среди других используются эвристики, определяющие максимальное количество рекуперированного тепла, минимум приведенных затрат при использовании внешних источников и т. д.

Прямой перебор вариантов схем с ростом числа потоков практически невозможен из-за высокой размерности задачи. Практически уже для шестипоточной схемы необходимо рассмотреть 10^{11} вариантов схемы. Поэтому использование эвристик и допущений весьма желательно. Так, алгоритм, построенный на эвристике (8.24), позволяет решать задачи разумной размерности [18]. Правда, метод может давать иногда заведомо неоптимальные решения, что приводит к необходимости использовать другие эвристики в таких ситуациях. Эта эвристика совместно с запретом на рекуперацию очень малых количеств тепла используется для синтеза теплообменной системы в сочетании с методом ветвей и границ [19]. Основным требованием к синтезируемой схеме является максимальная степень рекуперации тепла. Сочетание стратегии метода декомпозиции с эвристическими правилами было положено в основу декомпозиционно-эвристического алгоритма с обучением [5].

Большое число алгоритмов синтеза построено с использованием метода ветвей и границ [5, 20—22]. Основная идея алгоритмов состоит в последовательной генерации дерева вариантов, включающего все возможные системы теплообмена. Наряду с процедурой снижения размерности задачи в работе [20] предложен удачный способ формализации изображения систем теплообмена в виде матрицы связей потоков. На рис. 8.5 приведены система из двух холодных (θ_i) и трех горячих потоков (H_i) и соответствующая ей матрица связей, в клетках которой помещены номера теплообменников. Подобное представление (как и сам метод поиска) справедливо для систем без рециркуляционных потоков.

В алгоритме с углубляющейся стратегией поиска [21] решение ищется для каждого из технологических потоков. Задача синтеза при этом сводится к определению набора цепочек для каждого из технологических потоков, суммарная стоимость которых минимальна, и для которых соблюдается условие однократного взаимобмена. О размерности задачи можно судить по тому, что для системы из четырех потоков, имеющей 4200 вариантов, просматривается лишь 85. В качестве граничной стоимости схемы используется стоимость лучшей (минимальной стоимости) схемы на данный момент. В других алгоритмах [22] в качестве граничной стоимости схемы используются приведенные затраты синтезированной части

и прогнозируемая стоимость незавершенной части, оцениваемая на основе эвристик. Существенное сокращение просматриваемых вариантов схем может быть достигнуто в результате совместного использования эвристик и ограничений, например эвристики (8.26) и ограничения на многократность теплообмена потоков.

Среди алгоритмов второй подгруппы (при известной начальной схеме) интерес представляют методы, основанные на сведении задачи синтеза к «задаче о назначениях» [23—25], термодинамико-комбинаторные [26] и эволюционные [27, 28].

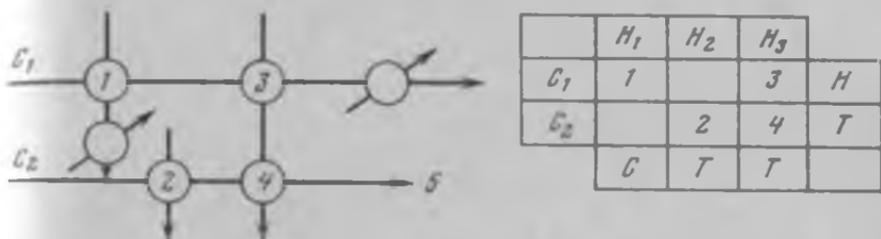


Рис. 8.5. Матричное представление системы теплообмена

H, C — для достижения конечной температуры требуется внешний холодо-, теплоноситель соответственно; T — поток достиг конечной температуры

При подходе к синтезу как к задаче о назначениях каждый поток делится на несколько малых субпотоков с теплосодержащим Q единиц. Разбиение может быть последовательным, что эквивалентно отсутствию расщепления потоков, и параллельным [1]. Величина Q выбирается таким образом, чтобы каждый поток был разделен на целое число частей. Проблема назначений состоит в том, чтобы выбрать такое сочетание горячих и холодных подпотоков, которое обеспечивало бы минимум затрат. Здесь же принимаются ограничения, отражающие термодинамическую реализуемость теплообмена (например, горячий подпоток должен быть горячее, чем холодный), а также ограничения пользователя. В такой постановке удобным аппаратом для решения задач большой размерности является линейное программирование. Слабым местом этого алгоритма является оценка стоимости подпотоков, связанная с поверхностью теплообменников. Графически алгоритм иллюстрируется в виде матрицы назначений, строки которой соответствуют холодным, а столбцы — горячим подпотокам. Точки пересечения означают теплообмен соответствующих частей потоков. При необходимости матрица может достраиваться строками и столбцами, соответствующими внешним субпотокам холодо- и теплоагентов.

Термодинамико-комбинаторный алгоритм [26] заключается в том, что генерируются все теплосистемы, удовлетворяющие таким ограничениям, как минимум внешней энергии, наименьшее количество теплообменников и отсутствие расщепления потоков. Затем рас-

считываются тепловые нагрузки на каждую операцию теплообмена и исключаются заведомо нереализуемые связи. На конечном этапе формируются системы, соответствующие каждому выбранному варианту. После расчета температур потоков выбираются системы, удовлетворяющие заданной разности температур.

Эволюционные алгоритмы синтеза наряду с другими имеют широкое распространение в практике разработки системы теплообмена. Надо заметить, что, по существу, каждый из рассмотренных алгоритмов синтеза использует в той или иной форме некоторую стратегию улучшения (модификации) полученной схемы. Вопрос лишь в том, в какой степени применяемые правила определяют конечный оптимальный вариант схемы. При этом начальный вариант (или варианты) может быть получен любым способом, а его усовершенствование проводится в соответствии со стратегией, например, обеспечения минимума поверхности теплообмена [27] или минимума числа теплообменников в системе [28].

Итак, алгоритмы синтеза систем теплообмена, ставящие целью обеспечить минимум внешнего потребления энергии (энергетически замкнутые системы) при минимальном (или близком к минимально возможному) числе теплообменников, имеют большое практическое значение при решении задач оптимального проектирования. Однако при повышении степени взаимосвязей в теплообменной системе будут ухудшаться такие характеристики, как надежность и управляемость, которым должно быть уделено внимание при синтезе не в последнюю очередь. Дальнейшее развитие методов синтеза теплообменных систем, очевидно, должно быть связано с интеграцией источников и стоков энергии различного рода в пределах химического производства. Задача синтеза в такой постановке существенно усложняется, но и результаты ее решения имеют большое значение в теоретическом и практическом аспектах.

Рассмотрим два алгоритма синтеза теплообменных систем более подробно.

Температурно-интервальный алгоритм синтеза теплообменных систем [28, 29]. В основе алгоритма лежит разбиение общей задачи синтеза на ряд подзадач с определенным температурным интервалом каждая. В пределах каждой подзадачи синтез может проводиться с использованием эвристических правил или эволюционной стратегии. Прежде всего устанавливается минимальная разность температур между горячим и холодным потоками, а затем температурная шкала потоков (от входной до выходной) делится на ряд интервалов в количестве

$$n \leq 2z - 1, \quad (8.27)$$

где n — число интервалов; z — число потоков. После вычитания из температур горячих потоков ΔT_{\min} последние располагаются в следующем порядке: $T_1 > T_2 > \dots > T_{n+1}$. Поскольку все по-

Потоки подзадач синтеза имеют одинаковый температурный интервал, каждая подзадача может рассматриваться независимо.

Пусть имеются четыре потока (свойства потоков приведены в табл. 8.2 [7]).

Таблица 8.2

Поток	Теплоемкость C_p , кВт/°С	T^H , °С	T^K , °С	Тепловая нагрузка $C_p(T^H - T^K)$, кВт
Холодный (1)	3,0	60	180	-360
Горячий (2)	2,0	180	40	280
Холодный (3)	2,6	30	105	-195
Горячий (4)	4,0	150	40	440

Соответствующая данным табл. 8.2 последовательность подзадач (ПЗ) синтеза, приведенная на рис. 8.6, построена следующим образом.

1. Потоки упорядочены в соответствии с некоторым признаком (температурой, теплоемкостью и т. д.).

2. В каждой подзадаче определен теплообмен между первым горячим (по значению температуры) и первым холодным потоками, вторым горячим и вторым холодным и т. д. до тех пор, пока не остались исходные горячие или холодные потоки.

3. Определен теплообмен между максимальным оставшимся потоком и максимальным вторичным после предшествующей операции теплообмена, между вторым максимальным и вторым максимальным остатком и т. д. (эти потоки объединяются с учетом их температур).

4. Оставшиеся потоки или остатки, которые не удалось рекуперировать в данном температурном интервале, могут быть переданы в соседние интервалы или объединены с внешними источниками тепла. Следовательно, для каждой подзадачи решается уравнение теплового баланса. Исходная схема теплообмена для рассматриваемой задачи приведена на рис. 8.7, а. Заметим, что на первом интервале имеется только один холодный поток, поэтому здесь решение однозначное — необходимо ввести в схему подогреватель. На втором интервале ПЗ(2) объединяются потоки 1 и 2, но, поскольку тепловая нагрузка горячего потока при изменении температуры в интервале на 30 °С не обеспечивает поднятие температуры потока 1 на 30 °С (в силу разной теплоемкости потоков), необходимо в систему на этом интервале включить компенсирующий подогреватель. Аналогичным образом строится последовательность взаимодействий потоков для остальных интервалов. Для подзадач 3—5 на рис. 8.7, б приведены альтернативные варианты решения (поскольку горячие и холодные потоки имеют одинаковые температуры).

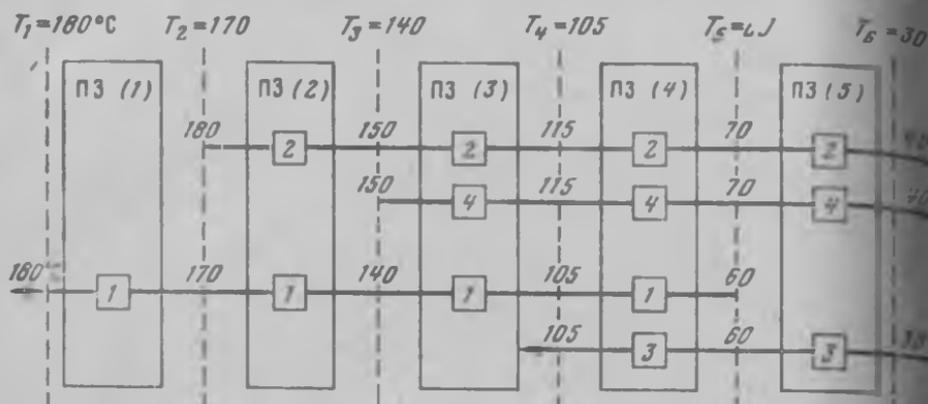


Рис. 8.6. Последовательность подзадач синтеза

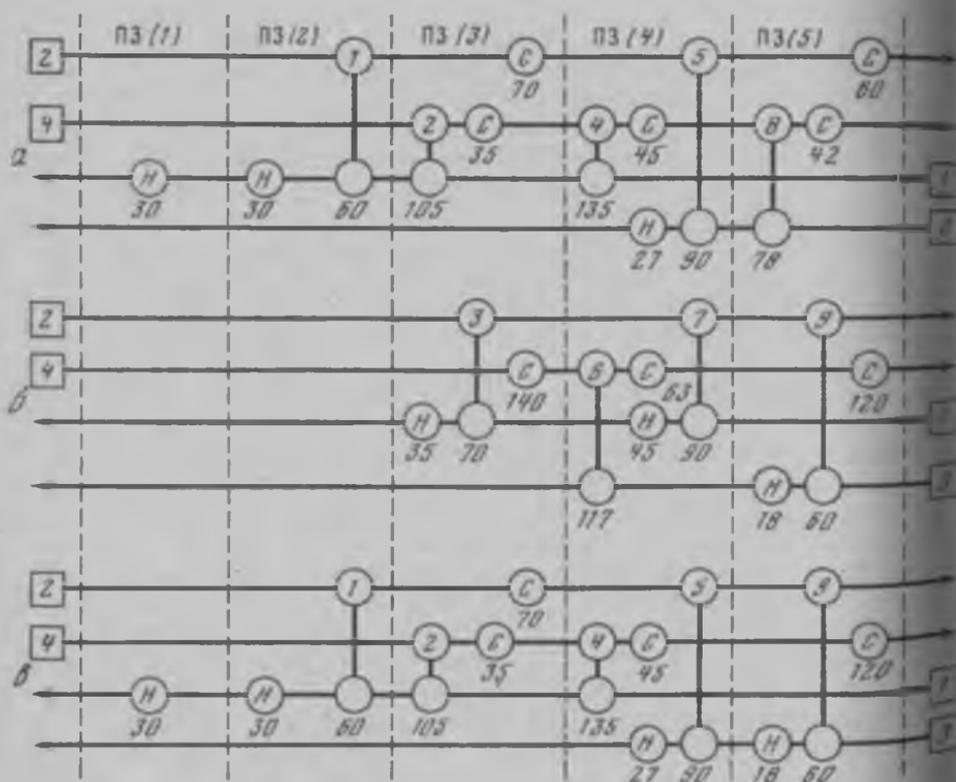


Рис. 8.7. Исходная система теплообмена

C, H — холодильник и подогреватель соответственно; цифры внизу — тепловая нагрузка; номера в кружках — порядковый номер теплообменника

На рис. 8.7 представлено решение в пределах каждой из подзадач. Единственное, что следует сделать теперь, это оценить альтернативные варианты для ПЗ(4) и ПЗ(5) с точки зрения минимума потребления внешней энергии. Что касается интервала ПЗ(3), то использование альтернативного варианта нецелесообразно, поскольку требуется введение дополнительного подогревателя. Из сравнения вариантов теплообмена для ПЗ (4) можно сделать вывод, что целесообразно принять первый вариант, поскольку в этом случае, как и для ПЗ(3), объединяются потоки 7 и 4. Это в дальнейшем позволит объединить два теплообменника в один большего размера. Для ПЗ(5) по аналогии следует выбрать второй вариант, с тем чтобы в последующем объединить теплообменники 5 и 9 в один.

Окончательный исходный вариант системы теплообмена, построенный на основе температурно-интервального алгоритма, приведен на рис. 8.7, в. Исходя из максимума рекуперации энергии в пределах всей системы этот вариант в дальнейшем подвергается усовершенствованию путем объединения, деления и перемещения отдельных теплообменников. Выполнение этих операций не должно противоречить физической реализуемости процесса теплообмена, а также способствовать получению варианта системы с лучшими параметрами, например с минимальным подводом внешней энергии, минимальным числом теплообменников и т. д. Эта задача на исходном варианте является поисковой, и для ее решения наиболее удобным режимом работы является режим диалога.

Модификация схемы на рис. 8.7, в может осуществляться следующим образом. Прежде всего следует объединить два подогревателя потоков 1 и 3 и три холодильника в потоке 4. Такое объединение вполне разумно, поскольку только увеличит разность температур между обменивающимися потоками (заметьте, что подогреватель нужно размещать с более горячей стороны теплообменника, т.е. слева, а холодильник — справа). Далее, холодильник во втором потоке следует разделить таким образом, чтобы можно было установить теплообменник между потоками 2 и 3 (тепловая нагрузка равна 45 кВт) и объединить его с двумя другими в этих же потоках (т.е. с теплообменниками под номерами 5 и 9). Аналогично можно объединить теплообменники с номерами 2 и 4 в потоках 1 и 4. Полученная в результате проведенных преобразований тепловая система, содержащая три теплообменника, один подогреватель и два холодильника, приведена на рис. 8.8, а.

Как следует из приведенных рассуждений, система, представленная на рис. 8.7, а, является исходной топологией для получения самых различных вариантов в зависимости от критерия и стратегии эволюции. Например, если исходить из максимума рекуперации тепла при относительно низкой стоимости системы, можно получить систему, приведенную на рис. 8.8, б. Для этого

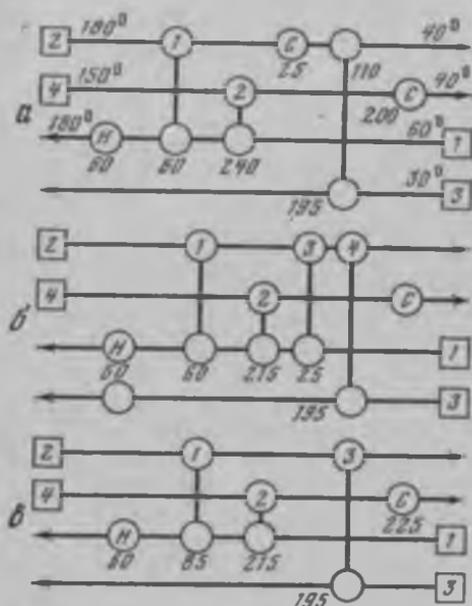


Рис. 8.8. Усовершенствование исходной схемы теплообмена

второй теплообменник делится на два и вместо холодильника на втором потоке ставится теплообменник 3, связывающий потоки 1 и 2. Соответственно увеличивается тепловая нагрузка на холодильник (поток 4). Дальнейшим видоизменением этой схемы является объединение теплообменников 1 и 3 (рис. 8.8, в).

Синтез систем более высокой размерности представляется трудоемким. Для ускорения расчета верхних оценок по нагрузкам на подогреватели и холодильники

для каждой подзадачи предлагается составление специальной таблицы (табл. 8.3), заполняемой в следующем порядке.

1. Устанавливаются температурные интервалы для каждой из подзадач.

2. Для каждой подзадачи определяется тепловой баланс по уравнению

$$D_k = I_k - O_k = (T_k - T_{k+1}) (\sum c_{px} - \sum c_{pg}), \quad (8.28)$$

где D_k — невязка теплового баланса ПЗ (k); I_k — количество теп-

Таблица 8.3

Подзадача	Потоки и температуры					Невязка баланса, кВт	Поинтервальное накопление тепла, кВт		Максимально допускаемая нагрузка, кВт	
	Горячие потоки		T, °C	Холодные потоки			Вход	Выход	Вход	Выход
	2	4		1	3					
	1	2	3	4	5					
ПЗ(1)			180	170	+30	0	-30	+60	+30	
ПЗ(2)			150	140	+30	-30	-60	+30	0	
ПЗ(3)			115	105	-105	-60	+45	0	+105	
ПЗ(4)			70	60	-18	+145	+63	+105	+125	
ПЗ(5)			40	30	-102	+63	+165	+123	+225	

да, получаемого от внешних источников; O_k — количество тепла, отбираемого внешними холодильниками; c_p — удельная теплоемкость потока. В зависимости от соотношения нагрузок подогревателей и холодильников (удельных теплоемкостей горячих и холодных потоков) D_k может иметь положительный или отрицательный знак.

3. Определяется максимальное количество энергии, передаваемое из ПЗ (k) в ПЗ ($k + 1$) (столбец 2 в табл. 8.3). При отсутствии специфических тепловых связей данной подзадачи с внешними источниками последнее может быть оценено как

$$I_{k+1} = O_k \quad (8.29)$$

(для первого температурного интервала принимается $I_1 = 0$). Выходное количество энергии для ПЗ ($k + 1$) (столбец 3) определяется как

$$O_{k+1} = O_k - D_{k+1} \quad (8.30)$$

4. Заполняются столбцы 4 и 5 добавлением модуля самого отрицательного элемента столбца 3 к элементам столбцов 2 и 3 соответственно.

Таблица построена на основе теплового баланса отдельных интервалов (подзадач), однако отдельные ее элементы имеют значение для всей системы теплообмена. Так, нижний элемент третьего столбца имеет значение, равное невязке теплового баланса потоков системы, т. е. количеству отводимого из системы тепла (см. табл. 8.2). Верхняя цифра в столбце 4 указывает на минимальное количество тепла, которое необходимо подвести к системе (см. рис. 8.6). Нижняя цифра в столбце 5 соответствует количеству тепла, которое необходимо отвести от системы (см. рис. 8.8). Таким образом, имеется возможность оценить значения нагрузок на подогреватели и холодильники исходя из максимума рекуперации тепла.

Рассмотренный алгоритм достаточно просто реализуется на начальном этапе синтеза теплообменных систем на основе критерия максимума рекуперации тепла. Однако как при получении базового варианта схемы, так и при его усовершенствовании используются определенные эвристические правила и эволюционные стратегии, связанные с опытом и эрудицией проектировщика и трудно поддающиеся формализации. Наиболее удобным режимом проектирования поэтому является режим непосредственного взаимодействия пользователя с ЭВМ. В этом случае любая стратегия получения оптимального (квазиоптимального) варианта схемы может быть легко реализована. Одной из важных задач для получения оптимального варианта теплообменной системы в соответствии с температурно-интервальным алгоритмом является объединение (расщепление) потоков и теплообменников, перемещение подогревателей и холодильников вдоль температурных градиентов потоков таким образом, чтобы обеспечивалась необходимая

разность температур. Для упрощения этой задачи предложена эволюционная стратегия, основанная на оценке тепловой нагрузки потоков по формуле [28]

$$F = c_{p(L)} (\Delta T S - \Delta T_{\min}) \quad (8.31)$$

где $c_{p(L)}$ — меньшая (большая) теплоемкость двух обменивающихся теплом потоков; $\Delta T S$ — наименьшая разность температур в теплообменнике; ΔT_{\min} — минимальная разность температур. Характеризуя каждый из теплообменников системы величиной параметра F , можно достаточно просто оценить реальность и эффективность изменения структуры системы.

Термодинамический метод синтеза теплообменных систем [16]. Анализ процессов химической технологии на основе первого закона термодинамики находит широкое практическое применение. Наряду с этим все большее распространение получают методы анализа на основе второго начала термодинамики, в частности (используемые исходя из концепции эксергии как меры превратимости энергии), при оптимизации и проектировании технологических производств (см. гл. 7). Привлекательность этих методов заключается в том, что имеется возможность оценить в общем случае минимально возможные потери энергии за счет необратимости процесса и тем самым определить реальные перспективы совершенствования процесса. Развитие этих термодинамических методов идет по пути получения количественной информации о совершенстве протекания отдельных явлений. Что касается качественных выводов, то они хорошо известны. Например, потери превратимой энергии отсутствуют при смешении потоков, находящихся в термодинамическом равновесии, или потери энергии в противоточном теплообменнике выше, чем в прямоточном, равно как с увеличением поверхности теплообмена потери за счет необратимости процесса снижаются.

Синтез теплообменных систем на основе термодинамических принципов проводится в несколько этапов [16]. Это определение оптимально-тепловой нагрузки системы (включая подвод и отвод тепла), синтез структуры теплообменной системы и модификация полученной системы с целью получения наиболее приемлемого варианта в соответствии с принятым критерием. Как и в большинстве методов, синтез проводится по эвристическим правилам.

В основе алгоритмов определения количества рекуперированного тепла используются диаграммы температура — тепловая нагрузка [30] или эксергетический КПД — тепловая нагрузка [31]. Если расположить фрагмент диаграммы холодных потоков под фрагментом диаграммы горячих потоков, то совмещенный участок будет соответствовать одному или нескольким теплообменникам (рис. 8.9, а). Операция сдвига диаграмм холодных потоков влево обычно продолжается до тех пор, пока минимальное расстояние между ними не достигнет минимально допустимой разности температур ΔT_{\min} .

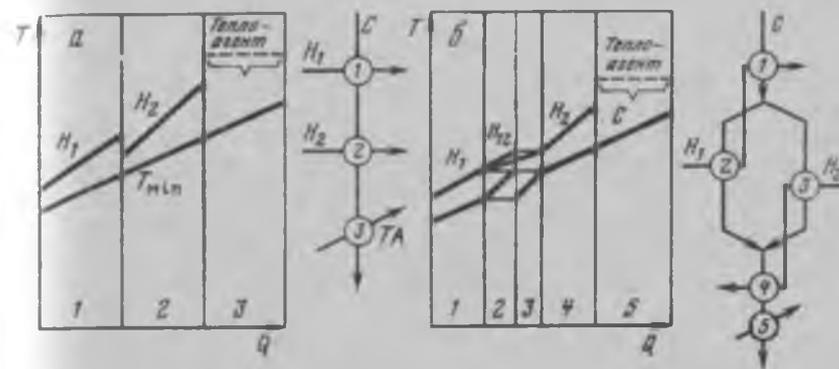


Рис. 8.9. Синтез систем теплообмена с помощью тепловых диаграмм а — сдвиг графиков до достижения T_{\min} ; б — слияние потоков; справа — соответствующие теплообменные системы

и теплообменнике или не будет полностью рекуперировано тепло одного из потоков. При этом для неперекрывающихся участков диаграмм необходимо использовать внешние источники тепла или холода. Таким образом, диаграмма позволяет определить не только количество рекуперированного тепла, но и нагрузки на внешние источники.

Дальнейшим развитием метода тепловых диаграмм является введение операции слияния потоков, принадлежащих одному и тому же температурному интервалу [31]. В результате слияния образуются два суперпотока — горячий и холодный, к которым в дальнейшем применяется операция сдвига. Система теплообмена, полученная в результате такого преобразования диаграммы, позволяет в максимальной степени экономить тепло, однако часто получается более сложной и содержит большее число теплообменников (рис. 8.9, б). Это вызвано тем, что слияние потоков приводит к их расщеплению. Построение исходной структуры теплообменной системы производится следующим образом. Тепловая диаграмма может быть разделена на несколько интервалов по оси абсцисс, число которых равно числу монотонных участков на графиках суперпотоков. Для каждого из интервалов выполняется балансовое соотношение и соответствующие потоки могут быть объединены теплообменом.

Синтез теплообменной системы в соответствии с термодинамическим методом состоит из следующих основных этапов.

1. Задание параметров входных и выходных потоков (расхода, свойств, температуры).
2. Построение диаграмм горячего и холодного суперпотоков.
3. Определение количества рекуперированного тепла и тепла (холода) внешних источников на основе уравнений баланса.

4. Определение минимальной поверхности теплообмена системы исходя из общих положений термодинамики и предположений о постоянстве коэффициентов теплопередачи.

5. Модификация системы с минимальной поверхностью исходя из некоторого критерия (термодинамического, экономического и т. д.) при неизменной тепловой нагрузке.

Отсюда следует, что синтез ведется итерационно с использованием различных процедур модификации (набора эвристик, эволюционной стратегии и т. п.). В качестве таковых можно использовать, например, следующие эвристики: постоянство параметра $(K/a) \cdot \Delta T$ (где K — коэффициент теплопередачи, a — стоимость единицы поверхности теплообмена); объединение теплообменников с малой поверхностью или тепловой нагрузкой. Изложенный алгоритм ограничен системами с одним горячим и одним холодным внешними потоками. Это ограничение снимается путем разбиения тепловой диаграммы по горизонтали на ряд зон, соответствующих температурам теплохладоагентов [1]. В этом случае рекуперация внутренних потоков производится отдельно по зонам в порядке убывания приоритета, определяемого шириной зон, а в пределах каждой зоны сдвиг диаграмм производится до точки касания или до совпадения правых и левых границ диаграмм.

При решении задач синтеза отдельных стадий химического производства наибольший интерес представляют алгоритмы, построенные с учетом специфики внешних источников и стоков тепла. Причем внешними по отношению к данной стадии могут быть потоки других стадий. Естественно, задача синтеза становится значительно сложнее, снижается управляемость производством вследствие появления дополнительных перекрестных связей, но достигается максимальная степень рекуперации энергии внутри схемы. По существу, этот переход от декомпозиционного принципа к совместному синтезу приводит к формированию соответствующей стратегии и критерия оптимальности. Совместный синтез в равной степени может привести к изменению традиционной структуры каждой из стадий, поскольку они будут формироваться исходя из единого критерия оптимальности. Примером такой стратегии является синтез теплообменной системы одноколонной ректификационной установки на основе термодинамического метода [31, 32].

Ректификационную установку можно представить состоящей из двух подсистем: собственно колонны и теплообменников (рис. 8.10). Теплообменники предназначены либо для подогрева, либо для охлаждения соответствующих потоков установки. Следовательно, одни потоки являются источниками тепла, т. е. должны охлаждаться, а другие — стоками тепла, т. е. нагреваться. Источниками тепла являются паровой поток верхнего продукта 2, дистиллят 4, кубовый продукт 5; стоками тепла являются питание 1, паровой поток в куб колонны 3. Помимо этого, имеются источник внешнего тепла 7 (теплоноситель) и внешний сток 6 (хладоагент). Совместный

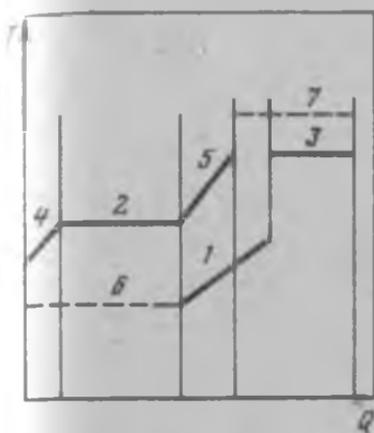


Рис. 8.10. Одноколонная ректификационная установка

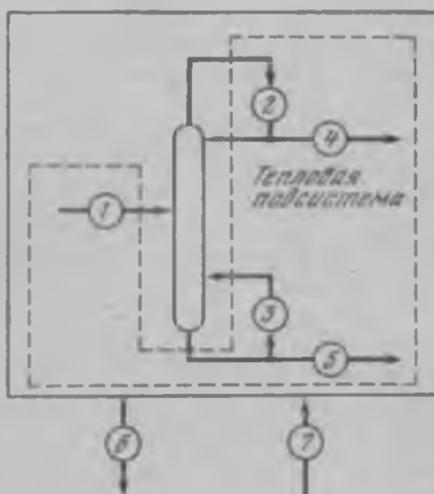


Рис. 8.11. Диаграмма тепловых потоков установки

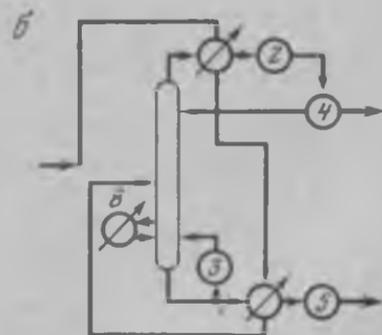
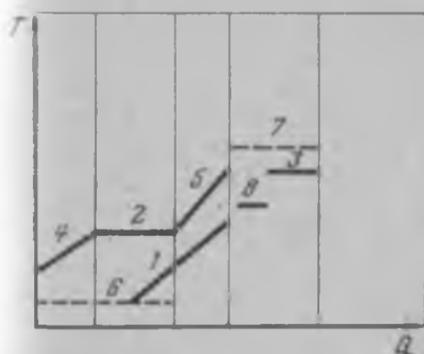
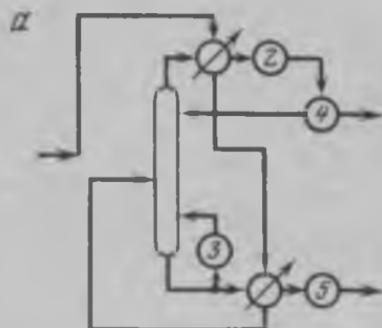
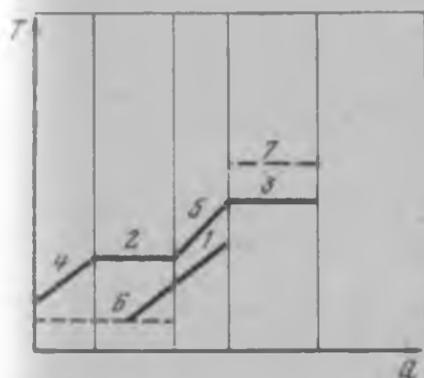


Рис. 8.12. Синтез тепловой системы ректификационной установки

ные диаграммы условных потоков «теплоносителя» и «хладоагента» ректификационной установки приведены на рис. 8.11 (для простоты функциональная зависимость $Q = f(T)$ принята линейной). Из рисунка следует, что и подогрев и охлаждение потоков ректификационной колонны производится за счет внешних источников, т.е. в системе полностью отсутствует рекуперация тепла, хотя такая возможность имеется. Действительно, тепло верхнего и нижнего продуктов (потоков 2 и 5) можно использовать для подогрева питания (потока 1). Тепловое объединение этих потоков приведет к появлению дополнительных теплообменников, а графически — к смещению нижнего графика влево (рис. 8.12, а). Чем больше смещение графика, тем большее количество тепла будет рекуперировано. Предельное положение графиков — точка касания, означающая, что разность температур при теплообмене равна нулю. Для того чтобы обеспечить условия дальнейшего теплового объединения потоков, необходимо изменить режим работы установки. Для этого необходимо либо повысить температурный уровень потоков — источников тепла, либо понизить температуру потоков — стоков. Практически изменение температурного уровня достигается путем изменения давления или установкой промежуточных кипятильников или конденсаторов. Последовательное применение операции смещения графиков суперпотоков (или отдельных их частей) и изменения температурного режима работы ректификационной установки позволяет синтезировать установку с максимальной степенью рекуперации тепла потоков.

Итак, синтез ректификационной установки с максимальной рекуперацией тепла потоков проводится с использованием трех основных операций (исключая изменение температурного уровня внешних источников энергии).

1. Изменение давления в колонне (операция f_p), что приводит к изменению температурного уровня потоков. Применение операции f_p обеспечивает снижение потерь превратимой энергии в области высоких температур и увеличение в области низких, но это в конечном итоге требует подвода большего количества внешней энергии, что может быть компенсировано за счет большей рекуперации.

2. Изменение температурного режима работы ректификационной установки включением по высоте дополнительных теплообменников или холодильников (операция f_T).

3. Сдвиг диаграммы холодного суперпотока (или его отдельных частей) влево для увеличения количества рекуперированного тепла (операция f_c).

Синтез состоит в последовательном применении операций (f_p , f_c) и (f_T , f_c) к тепловой диаграмме, в результате чего будет получена последовательность систем с тепловым объединением потоков. Следует иметь в виду, что применение операции f_T приводит

в усложнению установки, так как добавляются дополнительные теплообменники, и, как следствие, к снижению надежности, ухудшению управляемости. На рис. 8.12, б показано применение операции f_T к диаграмме на рис. 8.12, а.

Сложность теплообменной системы зависит от последовательности применения операций преобразования. Для упрощения этой последовательности предлагается следующая эвристика. Сначала операции (f_p, f_e) и (f_T, f_e) применяются к отдельным частям суперпотока, а затем ко всему суперпотоку применяются операции (f_p, f_e) . Помимо этого, можно применить и другие эвристики, например объединение теплообменников с малыми поверхностями, а также эвристики, связанные с обеспечением надежности, безопасности и гибкости системы. Все это предполагает использование интерактивного режима проектирования.

8.4. Синтез систем разделения

Задача синтеза систем разделения заключается в том, чтобы при известных свойствах исходной смеси X (количество, состав, температура, давление) определить стратегию получения целевых продуктов с заданными свойствами Y (количеством, концентрацией), т. е. топологию технологической схемы G , а также совокупность способов разделения — технологических операторов T (ректификации, экстракции, абсорбции, кристаллизации и т. д.) при оптимальном значении критерия функционирования (минимуме приведенных затрат, максимальной степени извлечения отдельных компонентов, минимальных энергетических затрат и т. д.). Формально можно записать

$$\Psi^* = \underset{G, T, P}{\text{opt}} \Psi(X, G, T, P, Y), \quad (8.32)$$

где P — конструкционные и технологические параметры.

Одним из распространенных способов оценки эффективности функционирования системы разделения является минимум приведенных затрат, записываемый в виде аддитивной функции затрат на отдельные стадии (аппараты):

$$\Phi^* = \min_{G, T, P} \sum_i \Pi p_i(X, Y), \quad (8.33)$$

где $i \in T$ — способ выделения продукта на i -й стадии; Φ^* — приведенные затраты на реализацию технологической схемы; $\Pi p_i(X, Y)$ — приведенные затраты на выделение i -го продукта.

Критерий (8.33) является аддитивной функцией критериев отдельных стадий и является частным случаем, применимым лишь к системам без рециклических потоков массы и энергии. В общем случае применение такого критерия неоправдано, поскольку неоптимальность отдельной стадии не является причиной неоптимальности схемы в целом.

При разработке алгоритмов синтеза систем разделения многокомпонентных смесей решаются две основные задачи. Во-первых, снижение размерности пространства поиска оптимального варианта (см. табл. 8.1) за счет эффективности алгоритмов, использования эвристических правил или эволюционной стратегии и, во-вторых, обеспечение замкнутости технологического производства по энергетическим (главным образом) и материальным потокам. Исходя из этих задач можно провести классификацию известных подходов к решению задач синтеза систем разделения.

По существу, все известные методы синтеза (см. разд. 8.1) имеют приложимость к системам разделения многокомпонентных смесей, и по уделяемому ему вниманию разделение можно поставить на второе место после систем теплообмена. Однако наибольшее распространение получили методы, которые можно разделить на три группы: эвристические, эволюционные и алгоритмические [1]. Этим методам на первом этапе было свойственно акцентирование внимания на снижении размерности задачи поиска оптимального варианта. Однако в дальнейшем все большее внимание уделяется разработке (модификации) алгоритмов применительно к решению проблемы создания замкнутых химических производств по энергетическим и материальным потокам.

Эвристические методы синтеза. Идея методов состоит в том, что в результате предварительного анализа технологической схемы формируется набор правил, отображающих накопленный опыт работы с аналогичными производствами и учитывающих общие закономерности протекания процесса. Наряду с эвристиками, вытекающими из физической сущности процесса, сюда могут включаться и интуитивные предположения по организации оптимальных схем. Основная причина применения эвристических правил состоит не в их высокой эффективности, а лишь в способности уменьшения количества анализируемых вариантов схем априори. Отсутствие теоретической обоснованности отдельных правил, их противоречивость и отсутствие связи с отдельными свойствами разделяемой смеси может помешать получению оптимального решения.

Ранее уже отмечалось, что все известные подходы к синтезу (не только систем разделения) используют в той или иной мере эвристические правила. Желательно, чтобы эти правила основывались на закономерностях протекания процесса, имели универсальный характер и формализованное выражение. Обычно используемые эвристические правила большей частью относятся к разделению идеальных (или близких к идеальным) многокомпонентных смесей. Что касается сильно неидеальных смесей, то получение таких «аксиом» крайне затруднено и синтез схем должен проводиться (и проводится) на основе глубокого анализа условий фазового равновесия (см. гл. 4).

Основная сложность разработки эвристического алгоритма

синтеза схем разделения заключается не в определении круга используемых правил (их известно достаточное количество — более 20), а в установлении непротиворечивой последовательности их с соответствующими весовыми коэффициентами. Некоторые эвристические правила, определяемые, например, физико-химической природой компонентов разделяемой смеси (коррозионные, термически нестойкие и склонные к полимеризации компоненты желательно выделять в начале технологической схемы), в большинстве случаев однозначно определяют выбор, в то время как применение других (например, предпочтительность прямой схемы и деление смеси в эквимолярном отношении) связано со свойствами разделяемой смеси.

Природа эвристик, как уже отмечалось, самая разнообразная. Это не только универсальные правила, но и частные рекомендации, справедливые в определенных условиях. В общем случае они могут быть подразделены на несколько категорий в зависимости от назначения и специфики возникновения [33].

А. Эвристики, определяющие выбор метода разделения при заданных свойствах смеси и требованиях на продукты разделения (М-эвристики); эта группа эвристик ограничивает пространство поиска варианта технологической схемы путем выделения параметров предпочтительных методов разделения (например, обычная ректификация, атмосферное давление и т. д.).

В. Эвристики, определяющие свойства проектируемой технологической схемы (Д-эвристики); эта группа эвристик отражает структуру схемы, определяя последовательность соединения аппаратов, ее эксплуатационные характеристики (например, прямая схема, минимальное число продуктовых потоков и т. д.).

С. Эвристики, отражающие специфические свойства компонентов разделяемой смеси (С-эвристики); эта группа эвристик в большей степени по сравнению с другими связана с физико-химическими особенностями компонентов и смеси в целом (например, коррозионность, различие по температурам кипения, наличие азотропов, химическое взаимодействие и т. д.).

Г. Эвристики, связанные с влиянием состава питания и продуктов разделения на эффективность проектируемой технологической схемы (П-эвристики); эта группа эвристик связана с обобщением опыта функционирования систем выделения целевых продуктов и формирования на его основе правил, априори предполагающих получение более эффективной технологической схемы (например, эквимолярность деления исходной смеси, использование стриппинг-секции и т. д.).

Каждая из категорий эвристик специфична для отдельных процессов разделения, однако применительно к химическому производству в целом могут быть выработаны и более обобщенные правила (например, отражающие требования энергетической оптимальности, минимума побочных продуктов, максимума реку-

перации вторичных энергетических источников и т. п.). Важно, что по мере углубления знаний об отдельных процессах большинство эвристик приобретает теоретическую основу.

Чаще всего эвристические правила используются в совокупности с учетом их противоречивости и альтернативности. Даже порядок применения определенного набора эвристик является сам по себе эвристическим правилом, широко используемым в эволюционных методах синтеза. Существуют методы синтеза, в основе которых эвристики объединяются на основе некоторого критерия [34]. Например, в качестве критерия выбора эвристик использован минимум суммарной тепловой нагрузки на систему [35]. Исходя из этого алгоритм построен на использовании эвристик об эквимолярности деления смеси и разделении близкокнпящей смеси в отсутствие неключевых компонентов.

Эффективность эвристических алгоритмов зависит от числа и типа эвристик, а также последовательности их применения. Этим объясняется большое разнообразие таких алгоритмов, отличающихся точностью поиска оптимального варианта, степенью снижения размерности пространства поиска и, следовательно, быстротой действия. Обычно эвристические алгоритмы используются в сочетании с другими (например, эволюционными или алгоритмическими) для получения некоторого исходного варианта схемы, который в последующем должен уточняться. Однако при удачном выборе эвристик и последовательности их выполнения они могут иметь самостоятельное значение, позволяя получать оптимальные или близкие к ним решения.

Эвристический алгоритм направленного поиска. Алгоритм основан на использовании семи эвристик в заданной последовательности [33]. Если в зависимости от конкретной ситуации некоторая эвристика неприменима или незначительна, то применяется следующая и т. д. Надо заметить, что установленный порядок выполнения эвристических правил не всегда соответствует реальным условиям протекания процесса. Поэтому пользователь-технолог должен иметь возможность внесения изменений в процедуру поиска оптимального варианта, т. е. работать в интерактивном режиме.

Синтез технологической схемы разделения многокомпонентной смеси проводится в несколько этапов, причем для каждого применяются соответствующие эвристические правила. Алгоритм заключается в следующем.

Этап 1. Выбор методов разделения:

а) эвристика М1. Для разделения смеси при одинаковых показателях различных методов разделения предпочтение следует отдать обычной ректификации. Если фактор разделения или отношение коэффициентов относительной летучести ключевых компонентов находится в пределах 1,05—1,10, то рекомендуется применение ректификации с разделяющим агентом (азеотропно-экс-

трактивная ректификация) при условии, что увеличивается отношение коэффициентов относительной летучести разделяемой пары; б) эвристика М2. Если используется разделяющий агент в системе, то его необходимо вывести непосредственно за точкой ввода;

в) эвристика М3. При необходимости предпочтительнее использование повышенного давления, нежели вакуума. В качестве альтернативы ректификации под вакуумом следует проанализировать применение жидкостной экстракции с различными растворителями. При разделении компонентов с низким температурными значениями альтернативой ректификации при пониженных температурах может быть абсорбция.

Этап 2. Выработка стратегии по установлению запретных разветвлений схем исходя из требований на продукты разделения:

а) эвристика Д1. При заданных количестве и требованиях на продукты разделения предпочтительнее схема с минимальным числом продуктовых потоков. Иными словами, следует исключать при рассмотрении схемы, в которых разделяются компоненты, составляющие один продукт (эта эвристика особенно важна при отборе в качестве продуктов отдельных фракций).

Этап 3. Выработка стратегии выбора начальных разветвлений схемы (составов продуктов первых колонн):

а) эвристика С1. Если в питании имеются коррозионные или токсичные вещества, то их необходимо вывести из схемы в первую очередь.

Этап 4. Выработка стратегии выбора конечных продуктовых потоков:

а) эвристика С2. Разделение компонентов с относительными летучестями, близкими к единице или различающимися незначительно, желательно проводить при отсутствии неключевых компонентов. Иными словами, деление близкокнпящих бинарных смесей должно проводиться в последнюю очередь.

Этап 5. Синтез технологической схемы разделения:

а) эвристика П1. Компонент, присутствующий в питании в наибольшем количестве, желательно выделить в первую очередь при условии, что имеется соответствующая разность температур кипения или относительной летучести.

б) эвристика П2. При соответствующих значениях коэффициентов относительной летучести исходная смесь делится между дистиллятом и кубом в отношении, близком к эквимолярному. В случае, если трудно выявить компонент исходной смеси в ранжированном списке (например, по коэффициентам относительной летучести), деление по которому максимально приближается к эквимолярному, первое деление можно провести по максимальному значению «коэффициента легкости разделения» определяемому как

$$P = f\Delta, \quad (3.34)$$

где f — отношение мольных потоков дистиллята и кубового продукта или наоборот (в зависимости от того, какое из этих отношений меньше или равно единице); Δ — разность температур кипения между разделяемыми компонентами; $\Delta = (\alpha - 1) \times 100$ (здесь α — коэффициент относительной летучести или фактор разделения бинарной смеси). Поскольку P содержит коэффициент относительной летучести или фактор разделения, применение алгоритма неявно зависит от температуры и давления в колонне. Удобная корреляция между оптимальным давлением вверху колонны P_D и нормальной температурой кипения питания T_F имеет вид $\ln P_D = 1,751(T_F + 273) - 6,777$, здесь P_D в МПа, T_F в $^{\circ}\text{C}$ [36]. Корреляция справедлива для $0,007 < P < 6,89$ МПа и $-72 < T < 699^{\circ}\text{C}$.

Последовательность применения эвристик рассмотренного алгоритма показана на примере разделения пятикомпонентной смеси легких углеводородов на чистые компоненты простой ректификацией. Свойства смеси приведены в табл. 8.4.

Таблица 8.4

Компонент	Мольная доля	Температура кипения, $^{\circ}\text{C}$	Коэффициент	
			относительной летучести	легкости разделения
Пропан, x_1	0,05	231,06	2,00	5,26
Бутан, x_2	0,15	261,33	1,33	8,25
Бутан, x_3	0,25	272,68	2,40	114,50
Пентан, x_4	0,20	301,04	1,25	13,46
Пентан, x_5	0,35	309,20		

Синтез технологической схемы разделения производится следующим образом.

Этап 1. Эвристики М1, М3. Для разделения выбрана обычная ректификация при высоком давлении.

Этапы 2, 3. Эвристики Д1, С1. Не применимы.

Этап 4. Эвристика С2. Бинарная смесь x_4/x_5 имеет наименьший коэффициент относительной летучести. Следовательно, эта смесь должна делиться в отсутствие компонентов x_1-x_3 .

Этап 5. Эвристика П1. Хотя компонент x_5 присутствует в питании в наибольшем количестве, его выделение в первую очередь запрещено в соответствии с эвристикой С2.

Эвристика П2. Исходная смесь в первую очередь делится в отношении $x_1x_2x_3/x_4x_5$, поскольку этому делению соответствует наибольшее значение коэффициента P , равное 114,50. В результате сравнения значений P при делении смеси $x_1x_2x_3$ в отношениях x_1/x_2x_3 ($f = 0,05/0,40$; $(\alpha - 1) \times 100 = 100$; $P = 12,5$) и x_1x_2/x_3 ($f = 0,20/0,25$; $(\alpha - 1) \times 100 = 33$; $P = 26,4$) выбирается

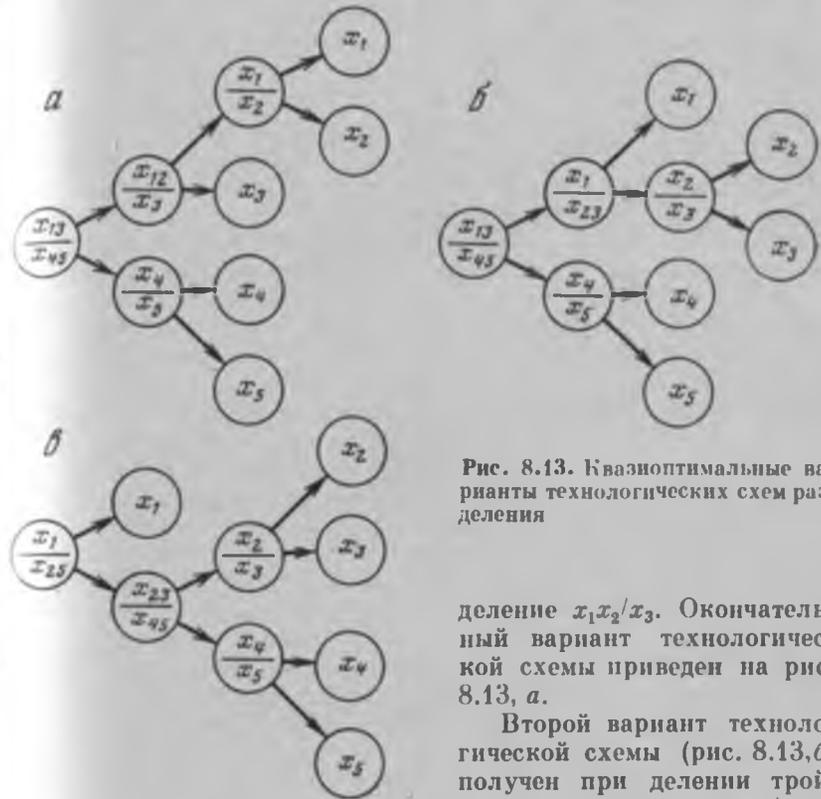


Рис. 8.13. Квазиоптимальные варианты технологических схем разделения

деление x_1x_2/x_3 . Окончательный вариант технологической схемы приведен на рис. 8.13, а.

Второй вариант технологической схемы (рис. 8.13, б) получен при делении тройной смеси в отношении x_1/x_2x_3 .

Если деление в первой колонне принимается в соответствии с эвристикой С2 (т. е. деление в отношении $x_1x_2x_3/x_4x_5$), то более не существует альтернативных вариантов. Поскольку эвристика С2 накладывает ограничение и на деление в отношении $x_1x_2/x_3x_4x_5$, третий вариант технологической схемы можно получить, если в первой колонне будет осуществлено разделение смеси в отношении $x_1/x_2x_3x_4x_5$ (рис. 8.13, в). По стоимости второй и третий варианты технологических схем отличаются от первого на 0,56 и 1,49% соответственно.

Ректификация является одним из энергоемких процессов химической технологии. Поэтому оптимальность системы разделения предполагает вторичное использование тепла потоков с целью сокращения внешних энергозатрат не только по отдельным установкам, но и по всей технологической схеме разделения многокомпонентной смеси. Тепловое объединение в пределах системы разделения возможно вследствие разности температур кипения компонентов продуктов отдельных колонн (при одинаковом давлении). В частности, верхний продукт одной колонны можно использо-

вать в качестве теплоносителя для подогрева кубового продукта другой или подогрева питания. Для этого необходимо выбрать структуру схемы, обеспечивающую по разности температур тепловое объединение потоков.

Исследования показывают, что оптимальные или квазиоптимальные варианты схем разделения без теплового объединения потоков с большой степенью вероятности обладают необходимыми свойствами для вторичного использования тепла [37]. Это обстоятельство существенно упрощает задачу синтеза схем разделения со связанными потоками, поскольку позволяет декомпозировать ее на две подзадачи, а именно: эвристическим или каким-либо другим методом синтезируется небольшое число квазиоптимальных технологических схем; полученная выборка (или часть) схем исследуется с точки зрения тепловой интеграции потоков.

Отмеченная взаимосвязь схем разделения без и с тепловым объединением потоков положена в основу другого эвристического алгоритма синтеза схем разделения идеальных (или близких к идеальным) многокомпонентных смесей [37]. При этом используется набор широкоизвестных эвристических правил, применяемых в следующем порядке.

1. Эвристика С2. Трудноразделяемые пары компонентов делятся в последнюю очередь.

2. Эвристика П2. Эквимолярное деление исходной смеси предпочтительнее.

3. Эвристика П1. Компонент, присутствующий в питании в наибольшем количестве, выделяется в первую очередь.

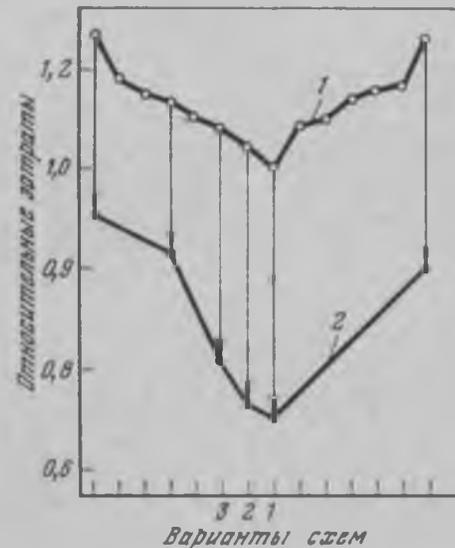
4. Эвристика Д2. Компоненты исходной смеси выделяются по прямой схеме (продукты отбираются сверху). В таких схемах рабочее давление обычно понижается от первой до последней колонны.

Петрудно заметить, что выбранные эвристические правила способствуют минимизации потоков в синтезируемой схеме. Действительно, присутствие неключевых компонентов при разделении близкоккипящих смесей приводит к увеличению флегмового числа и парового потока, увеличению температурного градиента (в общем случае этот вывод неверен — в зависимости от физико-химических свойств компонентов и смеси неключевой компонент может выступать в качестве разделяющего агента). Второе и третье эвристические правила также способствуют уменьшению количества питания на последующие колонны за счет отбора в первую очередь наиболее емких потоков. Четвертое правило определяет минимальный отбор дистиллята, следовательно, и паровой поток. Все это приводит к минимизации потоков неключевых компонентов в системе разделения и, следовательно, к снижению затрат тепла и градиентов температуры между кубом и дефлегматором колонны.

Алгоритм синтеза состоит в последовательном применении эвристик к исходной смеси.

Рис. 8.14. Сравнительная характеристика вариантов технологических схем

1 — без теплового объединения потоков; 2 — с тепловым объединением потоков



Эвристика С2. Трудноразделяемые пары компонентов делятся в последнюю очередь. Если правило применимо к нескольким парам компонентов (например, второе), то для них проверяется следующее правило и т. д., пока не выявится однозначное решение (справедливость нескольких эвристик). После этого производится расчет соответствующей колонны, оценка критерия эффективности.

пересчет потоков, составов и повторное применение эвристик к полученным смесям. Расчеты заканчиваются после получения всей совокупности заданных продуктов.

Применение изложенной стратегии синтеза технологической схемы для разделения смеси, свойства которой представлены в табл. 8.4, приводит к тем же вариантам схем, что и изложенный ранее алгоритм (см. рис. 8.13). Действительно, по эвристике С2 трудноразделимыми (относительно других пар) являются компоненты x_2/x_3 и x_4/x_5 , а самые легкоразделяемые — x_1/x_2 и x_3/x_4 (по разности температур кипения). Последовательно применяя эвристические правила к смеси, можно выявить, что наиболее предпочтительное деление $x_1x_2x_3/x_4x_5$, поскольку для него справедлива и эвристика П2. Следующим этапом была исследована возможность рекуперации тепла потоков при соответствующем изменении давления в колоннах. Эти результаты приведены на рис. 8.14, из которого видно, что квазиоптимальные варианты, выявленные без теплового объединения потоков, являются наилучшими среди остальных и при интеграции тепла. Эти выводы подтверждаются с выводами, полученными на основе термодинамического анализа (тепловых диаграмм).

Эволюционные методы синтеза. Эти методы в значительной степени являются развитием эвристических как в смысле получения исходного варианта схемы, так и определения стратегии ее совершенствования.

Эволюционная стратегия синтеза состоит, как уже отмечалось, из трех этапов. На первом выбирается исходная схема разделения по аналогии с действующими производствами, по литературным

данным или на основе эвристических правил. Чаще всего выбор производится на основе эвристик.

На втором этапе вырабатываются правила модификации исходного варианта схемы опять же на основе некоторых неформализуемых приемов, эвристических правил или структурных изменений схемы. Таким правилом может быть, например, изменение последовательности выделения компонентов или замена способа выделения продукта.

На третьем этапе вырабатывается некоторая стратегия применения правил изменения исходного варианта технологической схемы. Это может быть последовательное применение отдельных правил до получения варианта с лучшими характеристиками, генерация из начального этапа всевозможных вариантов схем на основе принятых правил и последующая их оценка, замена отдельных эвристик на альтернативные и тем самым снятие некоторых ограничений на условия проведения процесса.

Оценивая эффективность эволюционных методов, следует заметить, что они в основном ориентированы на интерактивный режим проектирования при наличии развитого прикладного математического обеспечения. Основным пользователем таких систем является специалист в области технологии, способный оценить реализуемость схемы и предложить альтернативные варианты в критических ситуациях.

В зависимости от способа получения исходного варианта технологической схемы принято называть эволюционные методы, например эволюционно-эвристическим, эволюционно-алгоритмическим и т. д., причем собственно эволюционность метода заключается в динамическом применении эвристик или практического опыта в локальном или глобальном масштабе.

Эволюционно-эвристический метод синтеза. Алгоритм синтеза заключается в генерации исходного варианта схемы с помощью эвристик и последующей модификации этой схемы в целом, а также применения эволюционной стратегии [38]. В отличие от ранее рассмотренного эвристического метода стратегия поиска исходного варианта схемы несколько отличается используемыми эвристическими и последовательностью их применения. Алгоритм состоит из следующих этапов (для эвристик, которые были использованы в предыдущих алгоритмах, указаны только номера).

Этап 1. Выработка стратегии по установлению разветвлений схемы исходя из требований на продукты разделения: а) эвристика Д1.

Этап 2. Выбор метода разделения: а) эвристика М1; б) эвристика М4 — использование в схеме метода с разделяющим агентом не должно препятствовать применению других разделяющих агентов; что указывает на своевременный вывод разделяющего агента; в) эвристика М3; г) эвристики вспомогательные: доля ключевых компонентов при разделении устанавливается равной

заданным значениям; для всех ректификационных колонн рабочее флегмовое число принимается равным $R = 1,3 R_{\min}$.

Этап 3. Синтез технологической схемы: а) эвристика СЗ — смеси, компоненты которых существенно различаются по коэффициентам относительной летучести, желательнее выделять в порядке увеличения коэффициента трудности разделения, определяемого как

$$T = \left\{ \left[\ln \frac{S_{LK}}{1 - S_{LK}} \frac{S_{HK}}{1 - S_{HK}} \right] / \ln \alpha_{LK, HK} \right\} \times \times \frac{D}{D + B} \left\{ 1 + \left[\frac{D - B}{D + B} \right] \right\}, \quad (8.35)$$

где S_{LK} , S_{HK} — мольные доли легкого и тяжелого ключевых компонентов в дистилляте и кубе соответственно; D , B — мольные потоки дистиллята и кубового продукта соответственно; $\alpha_{LK, HK}$ — коэффициент относительной летучести ключевых компонентов.

Этап 4. Применение глобальной стратегии модификации полученного варианта схемы. В основе стратегии модификации используются опять же эвристические правила, причем в качестве эволюционных правил принято изменение трех первых эвристик алгоритма. Применение каждой из эвристик приводит к значительному количеству вариантов схем, которые должны быть затем оценены в соответствии с критерием оптимальности схемы. Эффективность модификации первой эвристики алгоритма оценивается по величине коэффициента трудности разделения. Так, если значение T для вновь полученного варианта отличается более чем на 10% от исходного, то он подвергается детальному анализу и оценке. При этом ослабляется требование на использование пониженных температур. Изменение второй эвристики может привести к применению экстрактивной ректификации как метода разделения. Альтернативные варианты схем, получаемые в результате модификации второй и третьей эвристик, анализируются по «расширяющемуся» алгоритму поиска.

Наряду с глобальной стратегией известны алгоритмы с локальным применением эволюционных правил, т. е. к отдельным узлам схемы [35].

Алгоритмические методы синтеза. Эта группа методов наиболее развита именно применительно к системам разделения. Алгоритмические методы достаточно точные и надежные, однако сложные с вычислительной точки зрения. По используемым методам оптимизации, по подходам к проблеме синтеза эти методы можно подразделить на несколько подгрупп.

В теоретико-информационном подходе к синтезу схем разделения [39—41] используется понятие энтропии, характеризующей неупорядоченность рабочих потоков. Если разделение формально сопоставить с получением информации, то выбор оптимальной схемы равноценен выбору способа, при котором процесс получе-

ния информации осуществляется наиболее эффективно. При переходе от одной схемы к другой изменяются потоки продуктов. Последние выбираются исходя из максимума термодинамического (информационного) критерия эффективности, в качестве которого принимается сумма энтропий выбора для каждой колонны. Достоинством такого подхода к синтезу схем является попытка учесть вероятностный характер протекания процесса, однако используемый критерий оптимальности не отражает физико-химических свойств разделяемой смеси. Этот метод эффективен в тех случаях, когда отсутствуют ограничения, налагаемые фазовыми диаграммами, т. е. в случае разделения идеальных смесей.

Подход к синтезу схем разделения, основанный на методе динамического программирования, состоит в следующем [42—44]. Схема разделения многокомпонентной смеси рассматривается как многостадийный процесс без обратных потоков массы и энергии. В качестве стадий или подзадач выделяются колонны для разделения бинарных, тройных и т. д. смесей исходной системы. Начиная с колонн для разделения бинарных смесей отыскивается оптимальная в смысле принятого критерия колонна. Затем аналогично анализируются колонны для разделения тройных смесей и с учетом полученного результата предыдущей подзадачи выявляется вариант деления трехкомпонентной смеси. Последовательно переходя к анализу смесей с большим числом компонентов, можно вычислить значения критерия оптимальности для всех схем и выявить среди них оптимальный вариант. Достоинством методов, основанных на динамическом программировании, является строгая математическая формулировка и снижение размерности задачи синтеза до расчета числа всех возможных колонн. Однако наличие рециркулируемых потоков может существенно усложнить применение метода динамического программирования.

Снижение размерности пространства поиска в рамках этого подхода возможно при решении задачи в несколько этапов [44]. Задачей первого этапа является определение структур, локализуемых в области субоптимальных схем. В результате формируется матрица оптимальных подзадач элементами которой являются значения продуктовых фракций, отбираемых с одним из потоков, для всех возможных потоков в схеме. На основе анализа матрицы определяется совокупность схем, составляющая область субоптимальных схем. На каждом последующем этапе подлежат рассмотрению только те структуры, которые локализируются в области субоптимальных схем предыдущего этапа. В зависимости от числа вариантов схем в области применяются модели элементов различной сложности; в частности, на первом этапе расчет проводится по упрощенным методикам, что чревато потерей оптимального варианта схемы.

Представляет интерес подход к синтезу схем разделения, основанный на термодинамико-топологическом анализе структур

фазового равновесия [45, 46]. Основу этого подхода составляет анализ диаграмм фазового равновесия с целью выделения областей дистилляции и ректификации в концентрационном симплексе. Метод позволяет на основе свойств реальных смесей (что особенно важно при наличии азеотропов и расслаивания) предварительно, исходя из требований на продукты, отсеять заведомо переализуемые варианты технологических схем и тем самым вести поиск в заведомо более ограниченной области. Основным недостатком такого подхода к синтезу является сложность реализации этапа анализа структур фазовых диаграмм.

Следует заметить, что применение методов синтеза, основанных на формальном снижении размерности задачи (причем при расчете отдельных процессов по упрощенным моделям), может привести к потере оптимального варианта. При наличии в исходной смеси азеотропов, расслаивания или других характерных особенностей необходимым условием является учет их в моделях, т. е. использование точных моделей. Среди смесей, подлежащих разделению, лишь незначительное число можно рассматривать как идеальные. Большое число систем обладает существенными отклонениями от идеальности, и неучет их при синтезе приведет к заведомо неверным результатам. В этом смысле синтез на основе эвристических правил, сформулированных применительно к данной системе, позволит получить более реальные оценки.

Повышение энергетической эффективности систем разделения. Традиционным методом разделения многокомпонентных смесей является ректификация. Однако это один из энергоемких процессов с весьма низкой эффективностью. Так, максимальная эффективность процесса ректификации, определяемая как [47, 48] $E_{\max} = W_m/Q_m$, при разделении бинарной смеси состава $x_F = \{0,5; 0,5\}$ и коэффициента относительной летучести $\alpha = 3,0$ не превышает 6,6%. Здесь $W_m = -RT \sum_i x_{Fi} \ln x_{Fi}$ — минимальная работа разделения; $Q_m = \Delta H (\alpha - 1) + x_F$ — минимальное количество тепла на разделение в простой колонне при постоянстве потоков и коэффициентов относительной летучести; ΔH — мольная теплота испарения тяжелолетучего компонента.

Из-за низкой эффективности процесса ректификации постоянно ведутся исследования по снижению энергопотребления как отдельных ректификационных установок, так и систем разделения. Основными направлениями таких исследований являются термодинамический анализ ректификации с целью снижения потерь энергии за счет необратимости; усовершенствование промышленных процессов с целью более рационального использования энергии потоков внутри установки; поиск других способов получения чистых продуктов, более экономичных, чем ректификация; применение совмещенных процессов с целью более ра-

ционального объединения источников и стоков энергии внутри технологической схемы.

На основе выводов из законов термодинамики следует, что потери тепла обусловлены при ректификации, во-первых, неэффективностью теплового объединения источников и стоков энергии (например, использования тепла верхнего продукта для подогрева питания или куба колонны), во-вторых, неэффективностью обмена энергией и работой с окружающей средой. Путем снижения количества внешней флегмы и увеличения числа ступеней (высоты колонны), использования вторичной флегмы (перераспределения потоков по высоте колонны) можно существенно уменьшить степень необратимости процесса за счет смещения неравновесных потоков и уменьшить работу, необходимую для разделения смеси на чистые компоненты.

Эти выводы имеют большое практическое значение при поиске путей усовершенствования условий работы ректификационных колонн. Действительно, в последнее время сохраняется тенденция уменьшения флегмового числа вплоть до минимального. Поскольку при этом должна увеличиваться высота колонны, то действительная степень снижения флегмы может быть определена в результате анализа капитальных, эксплуатационных затрат на организацию и ведение процесса.

Среди способов усовершенствования условий протекания процесса можно выделить использование двухступенчатой конденсации верхнего продукта, циркуляцию флегмы и работу аппаратов или секций под различными давлениями. При двухступенчатой конденсации первый конденсатор обеспечивает необходимую флегму при температуре кипения, а второй — охлаждение продукта. При этом необходимо учитывать два фактора. Во-первых, смесь должна быть многокомпонентной и иметь разность между точкой росы и температурой кипения, и, во-вторых, температура верхнего продукта должна быть достаточно высокой с тем, чтобы этот поток можно было использовать для подогрева других потоков. Эффект, достигаемый по экономии энергии за счет теплового объединения потоков, будет определяться их количествами.

Наряду с использованием тепла верхнего продукта при разделении ширококипящих смесей можно отбирать тепло по высоте колонны через теплообменники. Это позволяет не только рекуперировать тепло, но и балансировать нагрузку по пару в укрепляющей части колонны.

Эффективным способом рекуперации тепловой энергии в ректификационных установках при разделении близкокипящих смесей является применение теплового насоса, т. е. использование тепла верхнего продукта при повышенном давлении для подогрева кубового продукта. Опыт эксплуатации ректификационных установок свидетельствует, что применение теплового насоса эффективно в тех случаях, когда: а) требуется прямой холодильник

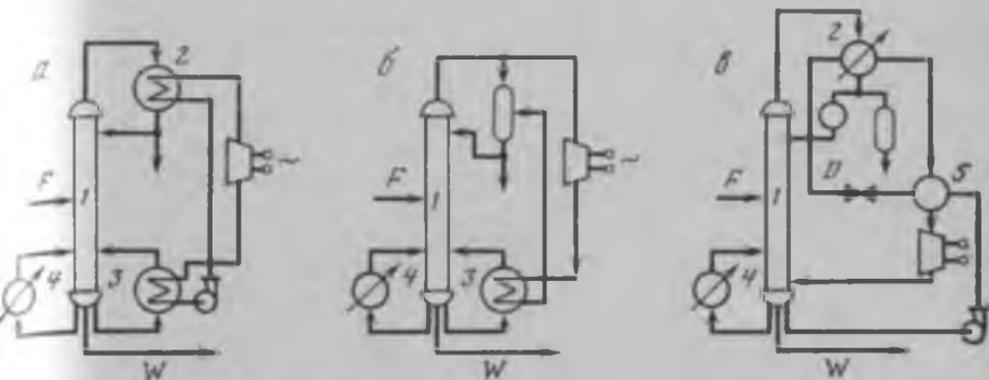


рис. 8.15. Схемы ректификации с тепловым насосом на конечных продуктах с внешним (а) и внутренним (б, в) теплоносителями на верхнем (б) и нижнем (в) продуктах

1 — колонна; 2 — конденсатор; 3 — кипятыльник; 4 — дополнительный кипятыльник; 5 — теплообменник

ник; б) температура кипения кубового продукта не выше 300°C ; в) в качестве хладагента используется вода; г) разделяемая смесь является близкок кипящей [49].

Тепловой насос на конечных продуктах может быть реализован по трем схемам (рис. 8.15). По первой схеме тепло передается циркулирующим теплоносителем, который испаряется в конденсаторе, отбирая тепло верхнего продукта, затем сжимается в компрессоре и при повышенной температуре поступает на обогрев кипятыльника. После конденсации насосом перекачивается в конденсатор и цикл повторяется.

По второй схеме в качестве теплоносителя используется верхний продукт, который после сжатия в компрессоре поступает на обогрев кипятыльника. После конденсации часть его возвращается в виде флегмы, а часть отводится в виде дистиллята.

По третьей схеме в качестве теплоносителя используется кубовый продукт. Последний после охлаждения в теплообменнике 5 через дроссель 6 поступает в дифлегматор 2 для конденсации верхнего продукта. Отсюда опять же через теплообменник 5 и компрессор он возвращается в колонну. Во всех случаях используются дополнительные кипятыльники для запуска колонны и восполнения тепловых потерь.

Применение теплового насоса предполагает дополнительный расход энергии на компримирование. Ее количество, очевидно, будет определяться необходимым отношением давлений, а также разностью температур кипения компонентов. Отношение давлений, т. е. степень сжатия парового потока, для идеальной смеси может быть определено по формуле [50]

$$\ln \frac{P_E}{P_D} = 10,5 \frac{\Delta T_b}{T_W} + 10,5 \frac{T_b \Delta T_E}{T_W (T_W + \Delta T_E)} + \ln \frac{P_W}{P_D}, \quad (8.36)$$

где T_b — температура кипения; остальные обозначения приведены на рис. 8.8. Сравнительный анализ затрат на обычную ректификацию и ректификацию с тепловым насосом на примере разделения бинарной смеси *цис-транс*-декалина по схеме на рис. 8.8, б в колонне диаметром 0,25 м со слоем насадки высотой 12 м показал, что энергозатраты во втором случае составляют 18% от затрат на обычную ректификацию.

Формула (8.36) позволяет сделать следующие предварительные выводы относительно стратегии проектирования колонны с тепловым насосом.

Прежде всего необходимо задать разность температур ΔT_E , т. е. движущую силу процесса теплообмена. Из формулы следует, что при увеличении ΔT_E уменьшается необходимая поверхность теплообмена, однако в этом случае необходимо обеспечить более высокое отношение давлений (возрастают потери за счет необратимости процесса теплообмена). Таким образом, снижение капитальных затрат (стоимости кипятыльника) приводит к увеличению капиталовложений на компрессор и энергетических затрат на поддержание повышенного отношения давлений.

При работе под вакуумом высокий перепад давления в колонне приводит к необходимости поддержания высокого отношения давлений. Следовательно, необходимо использовать насадку на тарелки с малыми перепадами давления.

Наличие конденсирующихся компонентов в паровом потоке приводит к необходимости увеличения отношения давлений.

Наряду с усовершенствованием ректификационных установок ведется поиск других способов получения чистых продуктов, менее энергоемких, чем ректификация. Правда, эти работы проводятся применительно к конкретным производствам и системам, физико-химические свойства которых позволяют применить другой способ разделения. В работе [51] рассмотрен пример замены ректификации диметилформамида из водного раствора экстракцией, кристаллизацией при пониженных температурах, многоступенчатой ректификацией с колоннами при различных давлениях, ректификацией в установке с тепловым насосом. Исходная смесь с массовой долей диметилформамида 12,5% в количестве 10 000 кг/ч поступала на разделение, концентрация целевого продукта составляла 99,9%. Результаты сравнения этих способов получения чистого продукта приведены в табл. 8.5.

Из таблицы следует, что по сравнению с обычной ректификацией другие способы получения диметилформамида менее энергоемкие. Значит, если ставить задачу экономии энергетических ресурсов, то любой из способов может быть принят вместо обычной ректификации. И наиболее эффективным, как и в ранее рассмотренном примере, остается ректификация с тепловым насосом. По сравнению с обычной ректификацией другие методы разделения сложнее в аппаратурном оформлении и по технологическим схе-

Таблица 8.5

Параметр	Экстракция	Кристаллизация	Ректификация с тепловым насосом	Двухступенчатая ректификация
Расход пара высокого давления, кг/ч	13 200	8700	12 700	12 700
Расход пара низкого давления, кг/ч	900	5900	200	5200
Расход охлаждающей воды, м ³ /ч	36	390	390	590
Экономия энергии, 10 ¹² Дж/год	220	230	250	150

мам. Поэтому для обеспечения устойчивого режима работы потребуются дополнительные средства на системы управления. При сравнении способов разделения в данном случае эти расходы не учитывались.

В отдельных случаях вопрос замены ректификации другим способом решается однозначно, например при выделении хлоридов. Предпочтительным способом получения хлоридов будет экстракция, так как компоненты обладают высокой коррозионностью, а ведение процесса при низких температурах снижает требования на выбор материала.

Вместе с тем ректификация остается доминирующим процессом разделения, и задача снижения энергозатрат должна решаться повышением эффективности ее работы. На стадии проектирования необходимо иметь более точные данные по парожидкостному равновесию, по кинетике массопередачи и гидродинамике потоков с тем, чтобы проектировать процесс с меньшими запасами по флегме, поверхности теплообмена, высоте аппаратов.

Большие возможности по созданию энергетически оптимальных технологических схем разделения лежат на пути исследования особенностей физико-химических свойств разделяемых смесей и учета последних при проектировании промышленных процессов. Сюда можно отнести использование свойства смеси к расслаиванию, что позволит уменьшить величины потоков за счет расслаивания последних в декантаторах, подбор разделяющих агентов для разделения близкиокпящих компонентов методом азеотропной или экстрактивной ректификации и т. д. Необходимо также рассматривать технологическую схему как единое целое с системных позиций и организовывать энергетически замкнутые производства с активным использованием тепла реакций, тепла более горячих потоков и т. д.

Теоретическая основа разработки совмещенных и энергетически оптимальных технологических схем лишь начинает формироваться, и фундаментальной основой ее является термодинамиче-

ский анализ отдельных аппаратов и схемы в целом. Тем не менее уже и сейчас отдельные примеры иллюстрируют наличие резервов повышения энергетической эффективности производств.

Второе начало термодинамики позволяет сформулировать отдельные положения, которые указывают пути исследований по созданию энергетически оптимальных схем. К ним относятся использование тепла экзотермических реакций для обеспечения системы энергией; использование внутренней движущей силы для ведения процесса (примером может служить установка по разделению воздуха и использование эффекта Джоуля—Томпсона); использование тепла на уровне его получения и ведение процесса при температуре, по возможности близкой к температуре окружающей среды (в этой связи следует заметить, что тепловой насос термодинамически неэффективен, так как создает большой градиент температур).

Снижение потерь за счет необратимости процесса ректификации является традиционной задачей исследования. Речь идет именно о снижении, поскольку при разделении многокомпонентных смесей реализация идеального процесса практически невозможна. Наличие достоверных моделей расчета колонн и теплообменной аппаратуры делает возможным определение оптимальных условий работы установок в настоящее время с достаточной точностью. На современном этапе исследований ставится вопрос о рациональном распределении энергии потоков внутри схемы и снижении непроеизводительных расходов тепла. Решение этой задачи становится возможным в результате применения системного анализа к исследованию химических производств.

Алгоритм упорядоченного поиска системы разделения. Алгоритм основан на использовании: а) процедуры упорядоченного поиска оптимального варианта схемы на дереве вариантов; б) ограничений, полученных на этапе анализа физико-химических и термодинамических свойств компонентов и смесей; в) оценки вероятной стоимости незавершенной части схемы; г) оценки возможности рекуперации тепла целевых и промежуточных потоков [52—54].

Задача синтеза схемы разделения формулируется следующим образом. Пусть для некоторой технологической схемы задана начальная ситуация $S(B)$, соответствующая в данном случае входу в систему смеси состава $\{x_1 x_2 \dots x_k\}$, и необходимо перейти от $S(B)$ ($S(B)$ можно сопоставить с вершиной на дереве вариантов схем разделения) в некоторую оптимальную по принятому критерию ситуацию, заданную структурой $S(T)$ и соответствующую выделению всех продуктов заданного качества $\{x_1 \wedge x_2 \wedge \dots \wedge x_k\}$. Для перехода из одной ситуации в другую, т. е. из вершины q_i к вершине q_j , имеется некоторое множество операторов разделения $\Gamma_i(q)$, где i — обозначает способ деления. И, наконец, пусть имеется список запрещенных ситуаций

$Z = \{z_1, z_2, \dots, z_m\}$, прохождение через которые не допускается (например, эвристические правила, ограничения типа физико-химических особенностей смеси и т. д.). Таким образом, требуется найти такую структуру $S(T)$, принадлежащую области всех возможных ситуаций (вариантов схем) и не принадлежащую области ограничений Z , для которой выполняются условия

$$g_{\text{пр}}(S^*(T)) = \min \{g_{\text{пр}}(S_j(q))\};$$

$$S(q) \in Q; \quad S(q) \notin Z; \quad S(T) = \bigcup_{i=1}^{k-1} q_i, \quad (8.37)$$

где $g_{\text{пр}}$ — критерий эффективности схемы — приведенные затраты.

Таким образом, задача синтеза оптимальной технологической схемы формулируется как задача поиска на дискретном множестве с ограничениями.

Все ограничения вариантов схем можно разделить на три категории. Это ограничения, вытекающие из анализа условий фазового равновесия, физико-химических и термодинамических свойств компонентов и смесей; ограничения, вытекающие из анализа тепловых потоков синтезируемой схемы и ограничения технологического характера.

Аналізу физико-химических и термодинамических свойств компонентов и условий фазового равновесия отводится при синтезе схем первостепенная роль. По существу, на него возложены функции генерации эвристических правил на основе исследования свойств реальных смесей. На этапе анализа выявляется, во-первых, принципиальная возможность применения того или иного способа получения целевых продуктов и, во-вторых, область принципиально возможных вариантов схем (см. гл. 4). Может оказаться, что отдельные компоненты смеси образуют азеотропы, и тогда для разделения последних необходимо применять процессы типа азеотропной ректификации, экстракции и т. п. Аналогичная ситуация возникает и при наличии близкокипящих смесей, разделение которых неэффективно обычной ректификацией. С другой стороны, анализ позволяет выявить такие характеристики компонентов (склонность к полимеризации, коррозионность и т. п.), которые будут определять начало технологической схемы. Выявление азеотропных смесей и их составов, определение границ областей непрерывной ректификации, а также других особенностей исходной смеси есть формирование эвристических правил, исходящее из физико-химических и термодинамических особенностей смеси, и их учет приводит к значительному сокращению размерности задачи синтеза.

При синтезе схемы, состоящей из цепочки колонн, снижение энергетических затрат возможно за счет рекуперации тепловых потоков внутри схемы благодаря различию температур кипения продуктов разделения. При синтезе гомогенной схемы разделения

многокомпонентной смеси методом ректификации источниками тепла являются потоки сверху колонны, а стоками — кубовые продукты. Вклад же потоков питания как источников (стоков) в общую задачу рекуперации энергии значительно меньше, нежели продуктов разделения. Анализ теплового баланса схем разделения и выявление вариантов, обеспечивающих рекуперацию тепла, позволяет уже на предварительном этапе синтеза дать сравнительную оценку технологических схем, которая должна учитываться при выборе оптимального варианта. Результатом анализа является матрица тепловых взаимодействий, содержащая информацию о возможных в пределах каждой схемы тепловых объединениях потоков. Эти данные не только ориентируют поиск оптимальной схемы, но в большинстве случаев позволяют и сокращать пространство поиска.

К ограничениям технологического характера относятся сведения, которыми может обладать пользователь априори относительно решения частных подзадач синтеза. Это, например, решения, полученные из патентной литературы; результаты лабораторных проработок отдельных узлов технологической схемы; решения, полученные на основании опыта эксплуатации аналогичных производств. Естественно, такие решения могут приниматься безусловно, что вновь приводит к сокращению области поиска оптимального варианта, или же выступать в качестве альтернативных, принятие которых будет зависеть от результатов сравнения с полученными вариантами.

Выявленные таким образом ограничения позволяют предварительно, до начала непосредственно синтеза определить стратегию поиска оптимального варианта технологической схемы и ограничить область его расположения. Возвращаясь к дереву вариантов схем, можно сказать, что этот этап позволяет исключить из рассмотрения заведомо неперспективные ветви.

Рассмотрим применение алгоритма на примере разделения четырехкомпонентной смеси $\{x_1, x_2, x_3, x_4\}$, компоненты которой расположены в порядке уменьшения коэффициентов относительной летучести. Смесь подлежит разделению на относительно чистые компоненты путем простой ректификации. Пространство поиска можно представить в виде дерева вариантов (рис. 8.16), вершина B которого является корнем дерева, соответствующим входу в систему исходной смеси. Остальные вершины q_i представляют собой стадии получения завершенной схемы разделения, ведущие к целевой вершине, соответствующей завершённому варианту схемы, т. е. ситуации, когда все целевые продукты выделены. Связи между вершинами (дуги) соответствуют операторам разделения $\Gamma_i (m/n) (i, j) [q]$, которые служат для перехода из какой-либо вершины q_i к желаемой вершине q_j с помощью оператора Γ_i и точки деления m/n (где m — легколетучий и n — тяжелолетучий компоненты в точке деления смеси). Каждой связи (дуге), соеди-

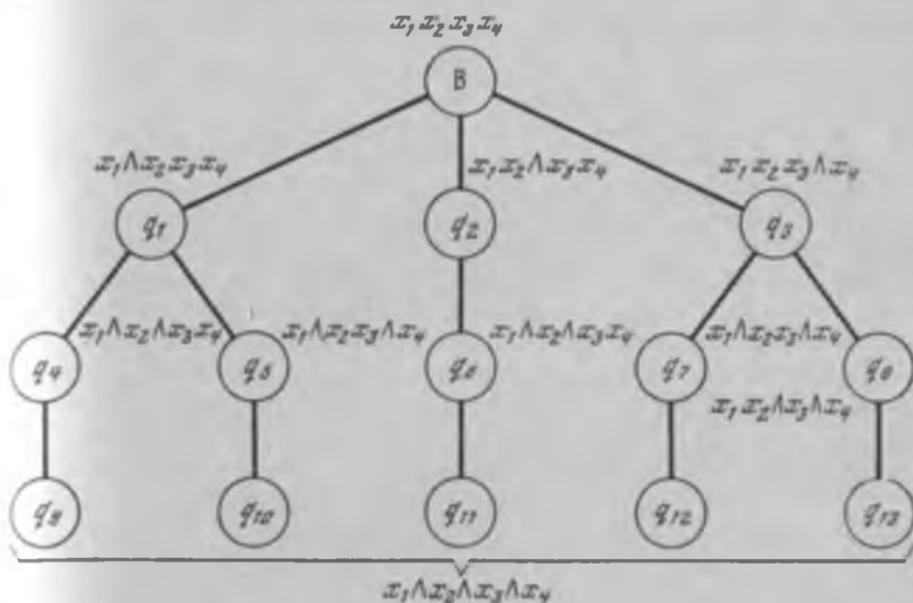


Рис. 8.16. Дерево вариантов схем разделения четырёхкомпонентной смеси ($t = 1$)

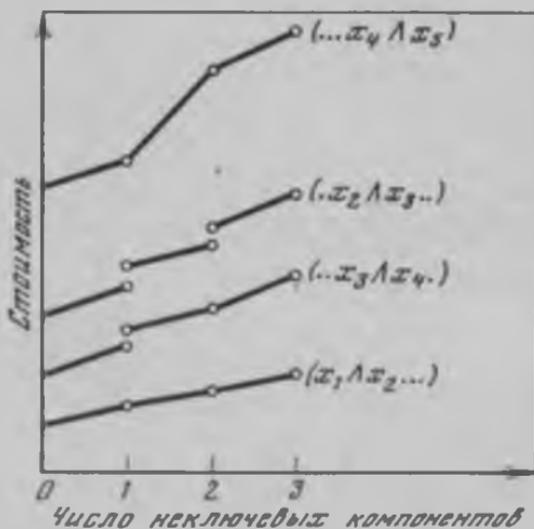


Рис. 8.17. Зависимость эвристической стоимости разделения от числа исключённых компонентов

няющей вершины q_i и q_j , отвечает стоимость $K(q_i, q_j)$ (стоимость колонны). Кроме того, с каждой вершиной связана действительная стоимость части технологической схемы от исходной точки B до данной вершины q_i — $R(B, q_i)$. Для того чтобы оценить стоимость всей технологической схемы, необходимо каким-то образом определить стоимость той части схемы, которая еще не рассматривалась в данной вершине. В качестве такой оценки используется прогнозируемая (эвристическая) стоимость, вычисленная на основании некоторых предположений. Тогда полная стоимость

технологической схемы будет определяться по формуле

$$g_j^*(B, T) = R(B, q_i) + K(q_i, q_j) + h^*(q_i, T), \quad (8.38)$$

где $h^*(q_j, T)$ — эвристическая стоимость незавершенной части схемы; звездочка соответствует оценочной в отличие от действительной стоимости.

Для процесса ректификации оценочную функцию h^* можно определить как сумму стоимостей бинарных ректификационных колонн для той части схемы, которая еще не синтезирована [52]. Здесь имеется в виду, что даже при наличии числа компонентов более чем два смесь рассматривается бинарной, состоящей из двух компонентов, по которым она делится. Это означает, что для h^* можно записать

$$h^*(q_j, T) = \sum_1^{n-1} K(q_i, q_{i+1}). \quad (8.39)$$

Эвристическое правило, записанное в виде (8.39), основано на предположении, что стоимость разделения компонентов m и n дешевле, если оно проводится в отсутствие неключевых компонентов. Было показано, что с увеличением числа неключевых компонентов в разделяемой смеси разность между действительной и эвристической стоимостями возрастает [52]. На рис. 8.17 показан характер изменения стоимости от числа неключевых компонентов на примере разделения пятикомпонентной смеси парафинов. Это правило справедливо также для абсорбции, азеотропной ректификации, жидкостной экстракции (при разделяющем влиянии неключевых компонентов это правило не соблюдается).

Таким образом, можно записать, что

$$h^*(q_j, T) \leq R_j(q_j, T). \quad (8.40)$$

Тогда из неравенства (8.40) следует, что для каждой завершенной схемы, выходящей из вершины B и заканчивающейся в целевой вершине T , справедливо условие

$$g_j^*(B, T) \leq g_j(B, T), \forall q_i. \quad (8.41)$$

Неравенство (8.41) является достаточным условием применимости алгоритма для нахождения пути минимальной стоимости (оптимального варианта технологической схемы). Это означает, что функция g^* является нижней границей и она может быть равна действительной стоимости только для завершенной схемы. Следовательно, если при раскрытии некоторой вершины другого пути действительная стоимость незавершенной схемы окажется больше эвристической, то эта ветвь дерева вариантов в дальнейшем не будет рассматриваться. Например, пусть при раскрытии вершины q_4 (см. рис. 8.16) была получена оценочная функция $g^*(B, T)$. Тогда, если при раскрытии вершины q_n (расчете колон-

ны для разделения смеси на фракции x_1, x_2, x_3 и x_4) действительная стоимость $R(B, q_3)$ оказалась выше $g^*(B, T)$, то этот способ не является перспективным и его не следует просматривать далее.

Следует заметить, что при $h^* = 0$ будем иметь алгоритм слепого поиска, например метод ветвей и границ или метод постоянной стоимости. Следовательно, эти алгоритмы могут рассматриваться как частные случаи более общего алгоритма.

Более гибкий путь использования эвристической функции состоит в том, чтобы согласно некоторому критерию на каждом шаге переупорядочивать полученные ранее вершины. В этом случае перебор мог бы продолжаться в тех участках пространства поиска, которые представляются наиболее перспективными. Упорядочивание вершин можно производить в соответствии со значениями оценочной функции g^* . В этом случае для очередного раскрытия выбирается вершина, имеющая наименьшее значение g^* . Такой поиск предполагает разветвление и направленность, т. е. сочетает в себе свойства углубляющегося и расширяющегося алгоритмов. Отличие состоит в том, что при раскрытии «перспективной» вершины необходимо получить две соседние вершины, т. е. использовать алгоритм поиска «по ширине». Это требование является особенностью данного алгоритма, и несоблюдение его может привести к потере оптимального варианта.

Рассмотренный алгоритм синтеза состоит из процедуры упорядоченного перебора с использованием на каждом шаге поиска «по ширине» или полной декомпозиции рассматриваемой вершины независимо от уровня завершенности схемы разделения.

Следует отметить, что в алгоритме нет необходимости использовать верхнее граничное значение стоимости, хотя последнее в некоторых случаях может значительно сократить пространство поиска оптимального варианта. Действительно, если окажется, что величина g^* для некоторой вершины q_j больше верхнего граничного значения, то через данную вершину не может проходить оптимальный вариант (эта вершина не лежит на пути минимальной стоимости) и нет необходимости производить дальнейшее ветвление. Анализ теплового взаимодействия потоков внутри схемы, по существу, является выбором верхней граничной оценки. Поэтому синтез схемы с учетом рекуперации тепла проводится на незначительной части пространства поиска и осуществляется достаточно быстро.

Генерация вариантов технологических схем. Поиск оптимального варианта технологической схемы по рассмотренному выше алгоритму производится с помощью контрольного списка, характеризующего каждую вершину и включающего в себя матрицу связей μ ; матрицу маршрутов деления μD ; вектор значений критерия оптимальности q ; вектор уровня завершенности схемы UR .

Контрольный список позволяет осуществить переход от вершины q_i к вершине q_j с учетом ограничений и идентифицировать

положение любой из них в пространстве поиска. Заполнение матриц производится следующим образом.

Если деление произведено, то в строку матрицы μ заносится числовой индекс (единица). Номер позиции в строке соответствует номеру компонента в ранжированном списке компонентов, по которому произведено деление. Принимается, что этим компонентом является легколетучий компонент из пары в месте деления. Например, если точка деления определяется как m/n , то номер этого компонента соответственно равен m . Номер строки в матрице соответствует номеру вершины q .

Состояние системы в произвольной вершине q_j описывается следующим набором числовых индексов в строке матрицы связей: 0 — деление не производилось; 1 — деление проведено в одной из предшествующих вершин; 2 — деление не производится, так как компоненты m и n выводятся как фракция (например, азеотронная смесь); 3 — деление производится только по компоненту m с номером, равным номеру столбца μ , в котором стоит данный числовой индекс; 4, 5, 6 — индексы для определения заданной последовательности деления.

Использование этих индексов позволяет учитывать физико-химические и термодинамические свойства смеси, проявляемые в виде ограничений.

В ходе синтеза в элемент строки матрицы μ заносится единица, если в нем не содержится числовой индекс 3 или в других элементах этой строки не содержится индекс 3.

В целевой вершине все элементы строки матрицы равны 1, что соответствует полностью завершенной схеме. Наличие в строке матрицы μ числового индекса 2 свидетельствует о том, что из системы выводится фракция, состоящая из двух или более компонентов. В этом случае размерность задачи синтеза существенно сокращается. Можно показать, что при делении семякомпонентной смеси с одним бинарным азеотропом число вариантов схем сокращается со 132 до 42. Размерность задачи еще более сокращается, если в строке μ содержится индекс 3. Этот индекс используется при наличии в разделяемой смеси компонентов, которые необходимо вывести в первую очередь. Индексы 4, 5 и 6 служат для ограничения пространства поиска только в той его части, в которой могут быть получены две или более фракций с заданными свойствами. Они используются на предварительном этапе синтеза, когда рассматриваются только те варианты схем разделения, в которых возможна организация теплового объединения внутри схемы. Здесь также обрабатывается заданная схема разделения отдельных компонентов, возможно, другим методом. На основании матрицы связей формируется матрица маршрутов делений.

В строку матрицы μD последовательно заносятся числовые значения, равные номеру позиции (точке деления) в строке матрицы связей μ , в которую был занесен числовой индекс 1. Как и в мат-

рице μ , номер строки соответствует номеру вершины, а количество заполненных при генерации вариантов позиций равно уровню завершенности схемы.

По числовым значениям строки матрицы μD , соответствующей некоторой вершине q_j , можно восстановить синтезированную часть схемы, т. е. элементы матрицы могут служить основанием для генерации схемы на любом этапе синтеза. Это позволяет не хранить в памяти информацию о вершинах, принадлежащих синтезированной части схемы.

Ранее отмечалось, что применение эвристики относительно незавершенной части схемы в некоторых случаях может привести к неверным результатам. Это возможно в том случае, если наличие неключевых компонентов в смеси сказывается на соотношении относительных летучестей компонентов, т. е. последние действуют как разделяющие агенты. Поэтому при переходе от вершины к вершине производится контроль достаточности условия (8.41), а именно

$$g_j^*(B, q_i) < g_j^*(B, q_{i+1}). \quad (8.42)$$

Если это условие не выполняется, то h^* полагается равным нулю и поиск ведется методом упорядоченного перебора.

Вектор UR характеризует уровень завершенности схемы в произвольной вершине, и по нему контролируется окончание работы алгоритма. В табл. 8.6 приведена последовательность заполнения контрольного списка при разделении четырехкомпонентной смеси без ограничений.

Таким образом, содержимое таблицы позволяет полностью идентифицировать вариант технологической схемы.

Эффективность алгоритма поиска на основе эвристической функции определяется не только самим свойством этой функции и стратегией выбора направления, но и тем, что при поиске учитываются ограничения, выявленные на этапе анализа физико-химических свойств, а также наличием верхнего граничного значения критерия, полученного на предварительном этапе синтеза с использованием матрицы тепловых объединений.

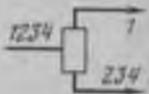
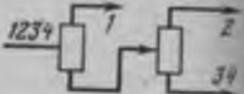
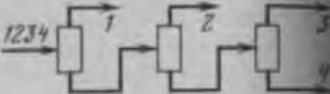
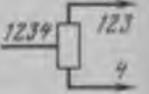
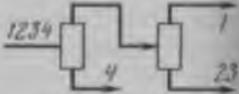
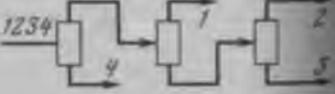
Чтобы получить сравнительную оценку эффективности предложенного алгоритма, можно воспользоваться критерием, называемым целенаправленностью [55] и определяемым как

$$\rho = L/V, \quad (8.43)$$

где L — количество вершин до целевой, равное числу компонентов без единицы, т. е. числу колонн в схеме; V — общее число вершин, построенных во время перебора, без начальной вершины, но включая целевую.

Перебор вслепую характеризуется малыми величинами ρ , что свидетельствует о кустистости дерева вариантов, т. е. поиск ведется по ширине. Правда, целенаправленность зависит не толь-

Таблица 8 6

УЛ	μ	μD	Схема
1	1 0 0	1 0 0	$x_1 \wedge x_2 x_3 x_4$ 
2	1 1 0	1 2 0	$x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 x_4$ 
3	1 1 1	1 2 3	$x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 \wedge x_4$ 
1	0 0 1	3 0 0	$x_1 x_2 x_3 \wedge x_4$ 
2	1 0 1	3 1 0	$x_1 \wedge x_2 x_3 \wedge x_4$ 
3	1 1 1	3 1 2	$x_1 \wedge x_2 \wedge x_3 \wedge x_4$ 

ко от метода поиска, но и от размерности задачи. Однако при общих равных условиях эта характеристика позволяет провести сравнительную оценку различных методов и получить количественные данные. Значение величины целенаправленности, полученное при разделении семякомпонентной смеси алкилбензолов, приведено в табл. 8.7.

Анализ возможностей рекуперации тепла. Тепловое объединение потоков внутри схемы является одним из путей повышения энергетической эффективности производства. За исключением отдельных работ [37, 56—58], эта проблема при синтезе технологических схем разделения многокомпонентных смесей не рассматривается, что объясняется высокой размерностью задачи и вычислительными трудностями оптимизации системы высокого порядка. Так, при разделении пятикомпонентной смеси имеется 14 различных вариантов схем и 20 типов колонн. Если же учитывать тепловое объединение, то необходимо рассматривать 63 пары

Таблица 8.7

Метод синтеза	Количество просматриваемых вершин	ρ
Динамическое программирование	56	0,107
Ветвей и границ	36	0,169
Упорядоченный поиск	19	0,319

колонн, которые могут объединяться между собой двумя способами. Число возможных схем разделения становится равным 350 [57]. Это к тому же при использовании только одного способа разделения, например ректификации. Тем не менее проблема представляется актуальной и отдельные решения лишь подтверждают это.

Процедура поиска возможных вариантов объединения потоков в пределах схемы разделения многокомпонентных смесей ректификацией отличается тем, что выявление возможностей рекуперации тепла проводится на этапе предварительного анализа свойств потоков без необходимости выполнения полных расчетов колонн. Выявляемые варианты теплового объединения в дальнейшем используются при синтезе как наиболее перспективные в смысле энергозатрат.

Вторичное использование энергии потоков для схемы ректификации без тепловых насосов возможно лишь при выполнении определенных условий, которые отражают физическую реализуемость теплообмена и имеют количественные характеристики, необходимые при автоматизированном синтезе схемы. К таким условиям или правилам можно отнести следующие [56].

1. Наиболее летучий компонент возможного потока должен располагаться вверху каждой последующей стадии (колонны) разделения. Поэтому потоки, содержащие подгруппы компонентов $\{x_1x_2x_3x_4\}$, $\{x_1x_2x_3\}$, $\{x_1x_2\}$, $\{x_1\}$, которые представляют собой составы возможных потоков, полученных в результате разделения исходной смеси, всегда должны быть источниками энергии (дистиллят) и между ними не может быть обмена теплом. Аналогичные рассуждения справедливы и для наименее летучего компонента возможного потока, который должен располагаться внизу каждой последующей стадии разделения, т. е. выступать в качестве стока энергии (кубовый продукт). Эти потоки также не могут объединяться между собой. Таким образом, рассматриваются потоки дистиллята колонн (источники энергии) и потоки кубового продукта (стоки энергии).

2. Энергетически объединяемые потоки должны иметь разность температур, обеспечивающую эффективные условия теплообмена, и обладать мощностью, достаточной для требуемого на

гревания всего потока в аппаратах приемлемых типов и размеров. Разность температур является лишь необходимым условием рекуперации тепла потоков. Окончательное решение принимается при расчете колонны подбором необходимого флегмового числа.

3. Совместно с источником и стоком тепла энергетическое объединение должно быть реализуемо в пределах технологической схемы. Один и тот же поток в схеме не может быть одновременно источником и стоком тепла.

В качестве дополнительных условий, упрощающих задачу, но не снижающих общность постановки, примем, что компоненты смеси могут выделяться в качестве целевых продуктов или в виде фракций заданного состава; поток может выступать в качестве источника тепла лишь однажды; питание в колонну поступает при температуре кипения.

С учетом сказанного задача нахождения источников и стоков энергии в системе может быть сформулирована следующим образом. Пусть разделение k -компонентной смеси можно провести с помощью m вариантов технологических схем s_i ($i = 1, 2, \dots, m$). Для обеспечения функционирования s_j -й технологической схемы необходимо l потоков q_i . Будем рассматривать только потоки верха и низа колонн. Тогда все потоки можно разбить на две группы — источники q_i^+ и стоки q_i^- , принадлежащие соответственно к областям Q^+ и Q^- , т. е.

$$Q^+ = \bigcup q_i^+; \quad Q^- = \bigcup q_i^- \quad (8.44)$$

Теперь задачу можно свести к следующему: из областей Q^+ и Q^- найти такие потоки q_i и q_j , которые удовлетворяют условиям

$$q_i \in s_j; \quad q_j \in s_i; \quad T_i > T_j \quad (8.45)$$

где s_j определяет потоки, принадлежащие j -му варианту технологической схемы. Очевидно, потоки, удовлетворяющие этим требованиям, составляют узкую область вариантов схем.

Анализ тепловых взаимодействий на предварительном этапе синтеза производится с помощью матрицы объединения тепловых потоков MQ , элементами которой являются логические переменные true, если данный вариант обмена возможен, и значение false, если обмен не возможен. Алгоритм состоит в построении матрицы MQ и выделении из нее тех вариантов теплового объединения потоков, которые реализуемы в данной схеме.

В том случае, если давление в системе — переменная величина, то температуры потоков, между которыми реализуется теплообмен, также меняются. Кроме того, изменение давления в колоннах существенно влияет и на общее количество тепла, подводимого к системе от внешних источников. При изменении давления меняются и величины относительных летучестей компонентов. Поэтому учет изменения давления в системе осуществляется с по-

мощью подматрицы давлений, которая ставится в соответствие подматрице составов и не меняет структуры предлагаемого метода поиска объединяемых потоков.

Формирование матрицы MQ начинается с заполнения подматрицы составов, представляющей собой составы возможных потоков верха и низа ректификационной колонны, и подматрицы давлений, если это необходимо. При этом предполагается, что на первом месте стоит наиболее летучий компонент данной фракции, а на последнем — наименее летучий. Подматрица составов заполняется на основании требований на качество целевых продуктов по каждому из компонентов или фракций. Некоторые трудности представляет определение составов продуктов каждой из колонн без расчета соответствующего аппарата. Заранее могут быть известны требования лишь по отдельным компонентам. Поэтому здесь можно воспользоваться тем, что составы задаются по уравнениям материального баланса колонны. При этом наличие в продукте компонентов, более тяжелых, чем целевой (для дистиллята), что может выясниться лишь после расчета колонны, лишь увеличит его температуру кипения, т. е. определение температуры кипения по материальному балансу позволяет находить минимально возможную температуру. Аналогично для куба колонны присутствие легколетучих компонентов снижает температуру кипения потока. В их отсутствие будет определена максимально возможная температура стока.

На основании составов продуктовых потоков рассчитываются подматрицы температур кипения и конденсации потоков, которые используются при последующем анализе матрицы тепловых объединений. С точки зрения принципиальной возможности объединения потоков нереализуемые варианты исключаются на том основании, что один и тот же компонент не может присутствовать в дистилляте (источнике тепла) и кубовом продукте (стоке тепла) при параллельной схеме разделения. Для последовательной схемы используется то, что поток, получаемый при разделении i -й фракции, не может быть объединен с потоком, получаемым в результате разделения j -й фракции компонентов. Алгоритм построения матрицы теплового объединения потоков приведен на рис. 8.18.

Матрица MQ позволяет только выявить возможность объединения потоков, но не выбрать из них оптимальное по принятому критерию. Окончательный выбор потоков, между которыми возможен теплообмен, производится на основании расчета величин тепловых нагрузок, проводимого на этапе синтеза схемы. Однако в некоторых случаях может возникнуть ситуация, когда потоки могут объединяться несколькими способами. Поэтому для выбора оптимального объединения потоков предлагается использовать эксергетический КПД работы теплообменного оборудования или термодинамический коэффициент теплообмена. Коэффициент эф-

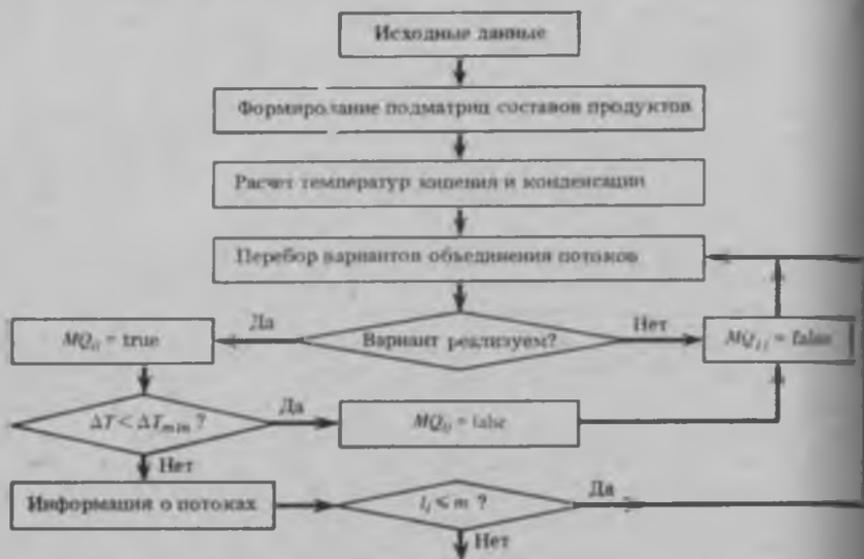


Рис. 8.18. Алгоритм формирования матрицы теплового объединения потоков

фективности процесса без учета потерь тепла в окружающую среду и гидравлического сопротивления теплообменного аппарата определяется по формуле

$$\eta = [T_r(T_x - T_n)] / [T_x(T_r - T_n)], \quad (8.46)$$

где T_x (T_r) — средняя температура холодного (горячего) потока, определяемая как $T = (T_0 - T_m) / \ln(T_0/T_m)$; T_0 — температура окружающей среды.

Таким образом, сформулированные правила генерации матрицы тепловых объединений позволяют без расчета величин тепловых нагрузок выявлять возможные варианты рекуперации тепла.

8.5. Синтез технологической схемы разделения алкилбензолов в производстве кумола

При синтезе технологических схем разделения многокомпонентных смесей обычно ставится задача поиска оптимального варианта в смысле минимальных капитальных и эксплуатационных затрат. Проблема состоит в том, чтобы найти такую последовательность выделения целевых компонентов, когда работа разделения каждой из колонн минимальная. Это соответствует подбору «легких» условий эксплуатации оборудования. Минимум капитальных затрат будут соответствовать условиям, когда разделяемые смеси можно отнести к ширококипящим. Тогда не требуются колонны

с большим числом тарелок. Минимуму эксплуатационных затрат будут соответствовать условия работы при флегмовых числах, близких к минимальным. Помимо этого, снижение эксплуатационных затрат можно достигнуть и уменьшением количества энергии, подводимой извне, за счет вторичного использования тепла продуктовых потоков. Причем чем выше производительность установки, тем больший эффект будет достигнут по снижению энергозатрат.

Постановка задачи исследования. Рассматриваемый технологический процесс предшествует стадии получения гидроперекиси изопропилбензола, используемой для производства фенола и ацетона. Задача состоит в разделении семикомпонентной смеси, состав которой приведен в табл. 8.8, на чистые компоненты с концентрацией 99%. Существующая технологическая схема приведена на рис. 8.19 [54].

Таблица 8.8

Компонент	Расход, кг/ч	Массовая доля, %	Компонент	Расход, кг/ч	Массовая доля, %
Бензол (1)	7579,4	47,55	Диизопропилбензол (5)	1386,1	8,3
Этилбензол (2)	101,3	0,47	Триизопропилбензол (6)	395,1	3,01
Изопропилбензол (3)	6219,6	38,95	Смола (7)	263,3	1,41
Бутилбензол (4)	86,76	0,31			

Примечание. Компоненты расположены в порядке убывания коэффициентов относительной легкости.

Исходная смесь алкилбензолов делится на шесть продуктовых потоков. В колонне 50 сверху отбирается товарный бензол, а кубовый продукт поступает в колонну 59, где он разделяется на два потока, поступающие в колонны 66 (дистиллят) и 75 (кубовый продукт).

Сверху колонны 66 отбирается этилбензол, а кубовый продукт поступает в колонну 83, где выделяются изопропилбензол и бутилбензол. В колонне 75 сверху отбирается фракция диизопропилбензола и триизопропилбензола, а снизу — смола. Состав и количества потоков схемы, представленной на рис. 8.19, приведены в табл. 8.9.

Синтез технологической схемы. Синтез схемы проводился в соответствии с логикой ранее рассмотренного алгоритма. Для проектного расчета ректификационных колонн использовались модели, изложенные ранее в гл. 8.

Рассматриваемая смесь относится к неидеальным гомогенным системам, не содержащим азеотропных составов. Поэтому отсутст-

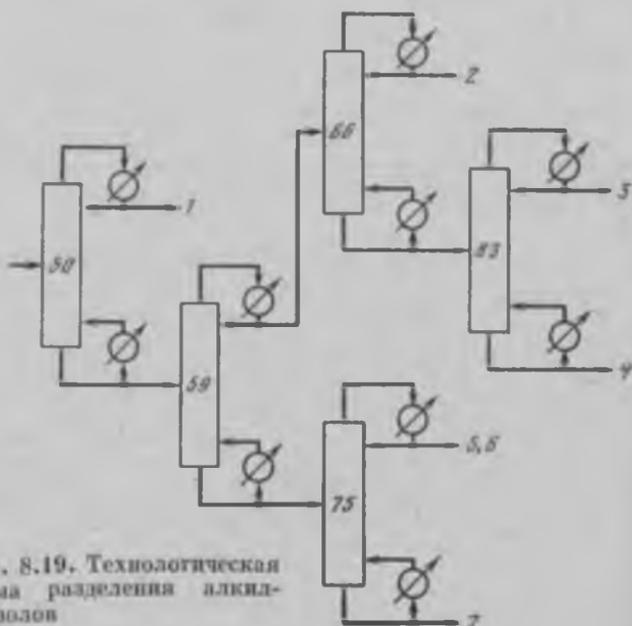


Рис. 8.19. Технологическая схема разделения алкилбензолов

вуют ограничения типа азеотропии и областей ректификации (разделяющих). К ограничениям физико-химического характера относится склонность полиалкилбензолов к полимеризации в отсутствие других компонентов. Это обстоятельство было учтено при генерации матрицы теплового объединения, в которой эти потоки не рассматривались как теплоносители. Матрица тепловых объединений приведена в табл. 8.10.

Анализ существующей технологической схемы позволяет сделать выводы, которые являются основой для проведения исследований по ее усовершенствованию. К таким выводам относятся следующие.

Целевыми продуктами производства являются бензол и изопропилбензол, в то время как остальные компоненты, имеющие коммерческое значение, извлекаются при концентрациях, менее чем 90%, что не позволяет использовать их как товарные продукты. Более того, компоненты (диизопропилбензол и триизопропилбензол) фракции, отбираемой из колонны 75, по стоимости во много раз превосходят стоимость фракции. Поэтому представляется целесообразным выделение их как целевых продуктов.

Из анализа матрицы тепловых объединений следует, что возможно тепловое взаимодействие между дистиллятом и кубовым продуктом, если в качестве первого отбирается изопропилбензол, а второго — этилбензол. Это означает, что при синтезе предпочтению будет отдаваться схемам, в которых этилбензол отби-

Таблица 8.9

Компонент	Дистиллят		Кубовый продукт	
	расход, кг/ч	массовая доля, %	расход, кг/ч	массовая доля, %
Колонна 50				
Бензол	7579,3	98,3	—	—
Этилбензол	16,4	0,2	84,9	1,02
Изопропилбензол	114,1	1,48	6105,83	73,34
Бутилбензол	—	—	86,76	1,04
Диизопропилбензол	—	—	1386,1	15,03
Триизопропилбензол	—	—	395,1	6,3
Смола	—	—	263,3	3,17
Колонна 59				
Этилбензол	84,9	1,36	—	—
Изопропилбензол	6105,8	97,26	—	—
Бутилбензол	86,8	1,38	—	—
Диизопропилбензол	—	—	1386,1	63,02
Триизопропилбензол	—	—	395,1	24,1
Смола	—	—	263,3	12,88
Колонна 66				
Этилбензол	84,9	91,0	—	—
Изопропилбензол	8,4	9	6097,3	98,6
Бутилбензол	—	—	86,7	1,4
Колонна 75				
Диизопропилбензол	1379,8	77,4	6,31	2,55
Триизопропилбензол	393,0	22,6	2,09	0,95
Смола	—	—	263,3	96,5
Колонна 83				
Этилбензол	84,9	91	—	—
Изопропилбензол	8,4	9	6097,3	98,6
Бутилбензол	—	—	86,7	1,4

рается в качестве кубового продукта, а изопропилбензол — дистиллята. По существу, это позволит определить нижнюю границу стоимости схем разделения. Информация о наличии схем с рекуперацией передается в матрицу связей с помощью индексов 4 и 5.

При раскрытии вершин на одном уровне завершенности первой будет раскрываться вершина, которой в матрице связей соответствует индекс 5. Вершина, которая совпадает с позицией

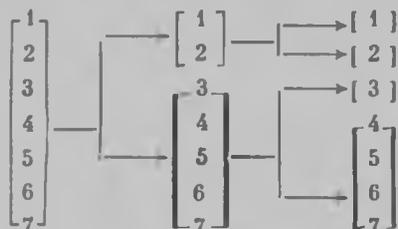
Таблица 8.10

Сток тепла ($T = 136^\circ \text{C}$)	Источники тепла ($T = 152^\circ \text{C}$)					
	1	2	3	1	2	3
2	—	—	+	—	—	—
3	—	—	—	—	—	—
4	—	—	—	—	—	—
2 3	—	—	—	—	—	—
3 4	—	—	—	—	—	—
2 3 4	—	—	—	—	—	—

Примечание. Цифры по вертикали и горизонтали обозначают соответственно кубовый продукт и дистиллят (номера компонентов из табл. 8.8). Знак «плюс» соответствует возможному тепловому объединению потоков.

индекса 4, будет раскрываться на следующем уровне завершенности после того, как в позицию с индексом 5 была занесена единица. Под позицией в матрице связей понимается номер столбца, соответствующий номеру компонента в ранжированном списке смеси.

Так как позиция индекса 5 соответствует точке деления 2/3, то компонент 2 (этилбензол) может быть только кубовым продуктом, а компонент 3 (изопропилбензол) только дистиллятом, что иллюстрируется следующей схемой (цифры в скобках соответствуют компонентам в ранжированном списке):



Процесс синтеза технологической схемы удобно представить в виде дерева вариантов (рис. 8.20). Построение дерева начинается с генерации дочерних вершин исходной вершины B , которая соответствует входу в систему исходной смеси компонентов $\{x_1, x_2, \dots, x_7\}$. При этом все массивы контрольного списка обнуляются, а в матрице связей сохраняются индексы 4 и 5, соответствующие вариантам схем с рекуперацией тепла. После построения вершин q_1, q_2, \dots, q_k рассчитываются действительные и эвристич-

Таблица 8.11

Параметр	q_3	q_4	q_5	q_6	q_7
n/m	2/3	3/4	4/5	5/6	6/7
UR	1	1	1	1	1
MD	410 000	451 000	450 100	450 010	450 001
MD_i	200 000	300 000	400 000	500 000	600 000
R_i	65,2	66,1	68,85	68,8	68,4
g_i	180,0	214,6	233,3	233,4	244,2

Таблица 8.12

Параметр	q_7	q_8	q_9	q_{10}
n/m	3/4	4/5	5/6	6/7
UR_i	2	2	2	2
M_i	011 000	010 100	010 010	010 001
MD_i	230 000	240 000	250 000	260 000
R_i	43,5	41,2	40,0	43,0
g_i	186,2	197,9	199,9	202,0

Таблица 8.13

Параметр	q_{12}	q_{14}	q_{15}
n/m	5/6	4/5	6/7
UR_i	3	4	5
M_i	011 010	011 110	011 111
MD_i	235 000	235 400	235 460
R_i	14,4	13,3	10,9
g_i	196,6	196,6	196,6

ветствующие значения элементов. Из табл. 8.12 следует, что далее «перспективной» является вершина, дистиллят которой к тому же является потенциальным источником тепла в соответствии с матрицей тепловых объединений. Аналогично после рассмотрения третьего уровня завершенности будет раскрываться вершина с номером 14, а затем 15, принадлежащие оптимальному варианту схемы. Значения элементов для этих вершин приведены в табл. 8.13.

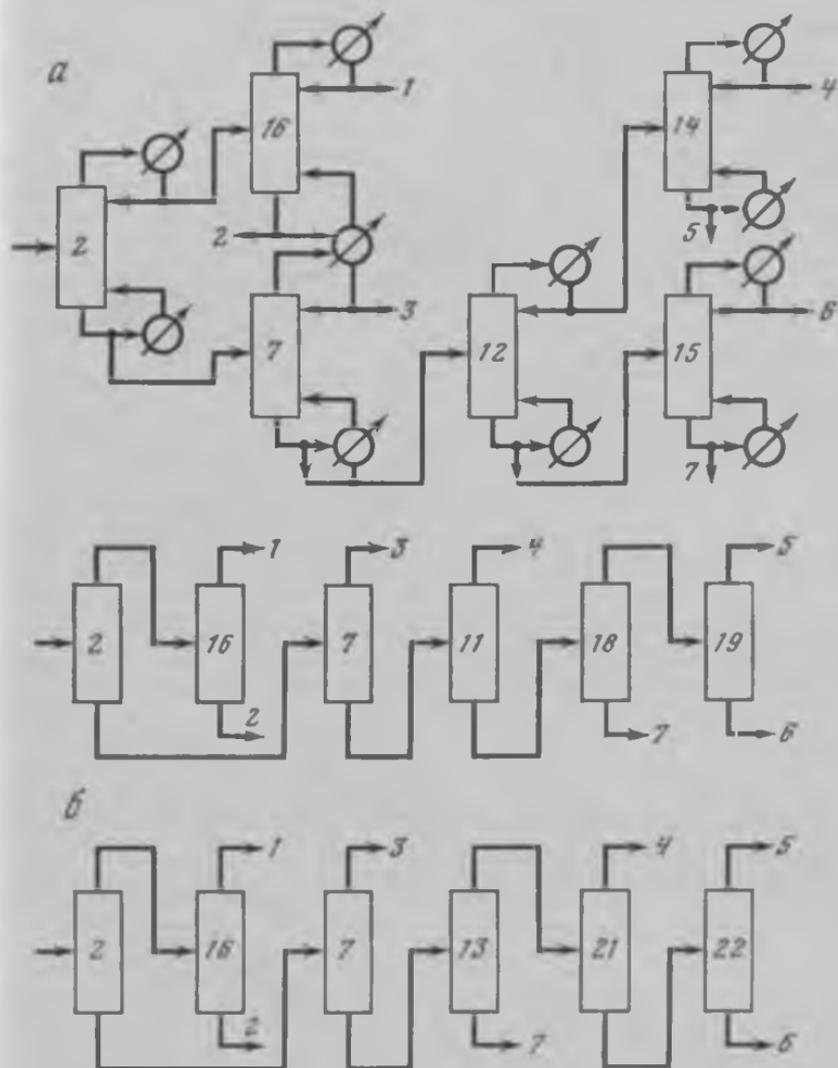


Рис. 8.21. Оптимальный (а) и квазиоптимальный (б) варианты технологической схемы

В процессе синтеза в каждой вершине контролируется уровень завершенности схемы. Если уровень завершенности вершины (значение UR_i), имеющей минимальное значение g_i , равен $k - 1$ (где k — количество компонентов), то такая схема соответствует полностью завершенному варианту. После этого по содержимому контрольного списка генерируется структура оптимальной технологической схемы. В случае выбора нескольких схем, отличающихся на заданную величину критерия оптимальности, про-

Таблица 8.11

Параметр	q_3	q_4	q_5	q_6	q_7
n/m	2/3	3/4	4/5	5/6	6/7
UR	1	1	1	1	1
MD	410 000	451 000	450 100	450 010	450 001
MD_i	200 000	300 000	400 000	500 000	600 000
R_i	65,2	66,1	68,85	68,8	68,4
g_i	180,0	214,6	233,3	233,4	244,2

Таблица 8.12

Параметр	q_7	q_8	q_9	q_{10}
n/m	3/4	4/5	5/6	6/7
UR_i	2	2	2	2
M_i	011 000	010 100	010 010	010 001
MD_i	230 000	240 000	250 000	260 000
R_i	43,5	41,2	40,0	43,0
g_i	186,2	197,9	199,9	202,0

Таблица 8.13

Параметр	q_{11}	q_{14}	q_{15}
n/m	5/6	4/5	6/7
UR_i	3	4	5
M_i	011 010	011 110	011 111
MD_i	235 000	235 400	235 460
R_i	14,4	13,3	10,9
g_i	196,6	196,6	196,6

ветствующие значения элементов. Из табл. 8.12 следует, что далее «перспективной» является вершина, дистиллят которой к тому же является потенциальным источником тепла в соответствии с матрицей тепловых объединений. Аналогично после рассмотрения третьего уровня завершенности будет раскрываться вершина с номером 14, а затем 15, принадлежащие оптимальному варианту схемы. Значения элементов для этих вершин приведены в табл. 8.13.

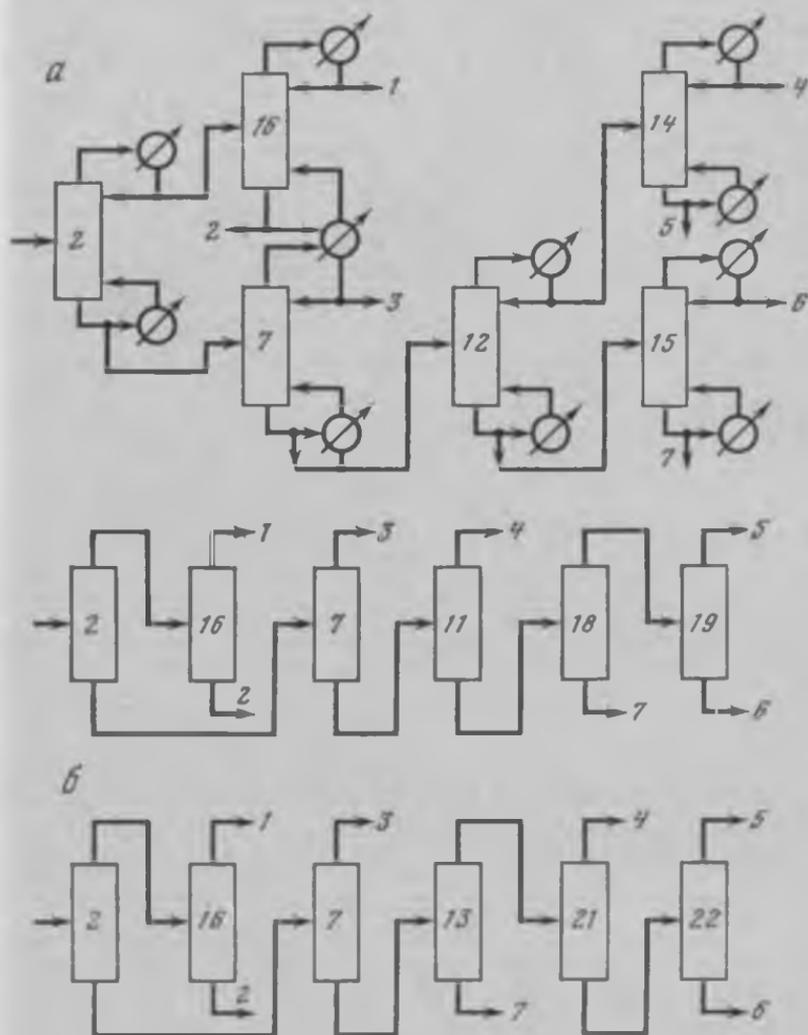


Рис. 8.21. Оптимальный (а) и квазиоптимальный (б) варианты технологической схемы

В процессе синтеза в каждой вершине контролируется уровень завершенности схемы. Если уровень завершенности вершины (значение UR_i), имеющей минимальное значение g_i , равен $k - 1$ (где k — количество компонентов), то такая схема соответствует полностью завершенному варианту. После этого по содержимому контрольного списка генерируется структура оптимальной технологической схемы. В случае выбора нескольких схем, отличающихся на заданную величину критерия оптимальности, про-

водится генерация и этих схем (так называемых квазиоптимальных вариантов). При этом нет необходимости в проведении дополнительных расчетов — вся информация о них содержится в контрольном списке.

После построения вершины q_{16} выявляется полная схема оптимального варианта. Кубовый продукт этой колонны является

Таблица 8.14

Компонент	Дистиллят		Кубовый продукт	
	количество, кмоль/ч	массовая доля	количество, кмоль/ч	массовая доля
Колонна 2				
Бензол	0,970 · 10 ³	0,978	0,179 · 10 ⁻⁴	0,280 · 10 ⁻⁶
Этилбензол	0,111 · 10 ¹	0,112 · 10 ⁻¹	0,329 · 10 ⁻²	0,515 · 10 ⁻¹
Изопропилбензол	0,102 · 10 ¹	0,103 · 10 ⁻¹	0,502 · 10 ²	0,813
Бутилбензол	0,149 · 10 ⁻³	0,150 · 10 ⁻⁵	0,647	0,101 · 10 ⁻¹
Диизопропилбензол	0,123 · 10 ⁻³	0,124 · 10 ⁻⁵	0,855 · 10 ¹	0,134
Триизопропилбензол	0,979 · 10 ⁻⁴	0,987 · 10 ⁻⁶	0,193 · 10 ¹	0,302 · 10 ⁻¹
Смола	0,624 · 10 ⁻⁴	0,629 · 10 ⁻⁶	0,822	0,128 · 10 ⁻¹
Колонна 7				
Изопропилбензол	0,517 · 10 ²	0,990	0,253	0,207 · 10 ⁻¹
Бутилбензол	0,149 · 10 ⁻²	0,288 · 10 ⁻⁴	0,647	0,529 · 10 ⁻¹
Диизопропилбензол	0,616 · 10 ⁻³	0,119 · 10 ⁻⁵	0,855 · 10 ¹	0,701
Триизопропилбензол	0,489 · 10 ⁻³	0,945 · 10 ⁻⁵	0,193 · 10 ¹	0,158
Смола	0,312 · 10 ⁻³	0,603 · 10 ⁻⁵	0,822	0,673 · 10 ⁻¹
Колонна 12				
Бутилбензол	0,647	0,703 · 10 ⁻¹	0,149 · 10 ⁻³	0,538 · 10 ⁻⁴
Диизопропилбензол	0,855 · 10 ¹	0,929	0,135 · 10 ⁻¹	0,489 · 10 ⁻²
Триизопропилбензол	0,979 · 10 ⁻⁴	0,106 · 10 ⁻⁴	0,193 · 10 ¹	0,698
Смола	0,625 · 10 ⁻⁴	0,679 · 10 ⁻⁵	0,821	0,296
Колонна 14				
Бутилбензол	0,646	0,99	0,745 · 10 ⁻³	0,870 · 10 ⁻²
Диизопропилбензол	0,616 · 10 ⁻³	0,95 · 10 ⁻³	0,854 · 10 ¹	0,99
Колонна 15				
Триизопропилбензол	0,646	0,99	0,75 · 10 ⁻³	0,87 · 10 ⁻²
Смола	0,616 · 10 ⁻³	0,16 · 10 ⁻³	0,854 · 10 ¹	0,99
Колонна 16				
Бензол	0,970 · 10 ²	0,998	0,128 · 10 ⁻³	0,130 · 10 ⁻²
Этилбензол	0,154	0,158 · 10 ⁻²	0,954	0,99

потоком тепла и объединяется с потоком дистиллята колонны 7 (изопропилбензол). Контрольный список для вершины представлен ниже.

n/m	UR_i	M_i	MD_i	R_i	g_i
1/2	6	111 111	235 461	196,6	196,6

Для получения квазиоптимальных вариантов схем, отличающихся по затратам на 1%, производится расчет вершин q_{17} , q_{18} , q_{19} , q_{20} , q_{21} и q_{22} . Все схемы имеют общее начало и включают колонны с рекуперацией тепла.

Тепловое объединение потоков колонн 7 и 16 позволяет снизить энергетические затраты на 25% от общего количества, необходимого для ведения процесса. Это позволяет вычислить граничное значение стоимости с учетом рекуперации как $g_i^r = g_i^* - P_Q$, где P_Q — экономия за счет рекуперации тепла.

Расчитанное граничное значение оказалось меньше всех оценочных стоимостных функций для области, которая исследовалась, что исключило необходимость дальнейшего проведения синтеза. Всего было просмотрено 22 вершины дерева вариантов при общем количестве 56. Оптимальная технологическая схема, полученная в результате синтеза, приведена на рис. 8.21. Здесь же приведены варианты схем, отличающиеся от оптимальной по затратам на 1%. Количества и составы потоков оптимальной технологической схемы приведены в табл. 8.14.

8.6. Синтез технологической схемы получения винилацетата

Винилацетат-сырец представляет собой смесь, содержащую наряду с винилацетатом большое число побочных продуктов, которые подразделяются на низкокипящие (температура кипения ниже 72° С) и высококипящие (температура кипения выше 72° С), причем многие из них даже не идентифицированы. Состав винилацетата-сырца, принимаемый в расчетах, приведен в табл. 8.15.

Таблица 8.15

Компонент	Массовая доля, %	$T_{кип}$, °С	Компонент	Массовая доля, %	$T_{кип}$, °С
Ацетальдегид (АА)	0,57	21	Кротоновый альдегид (КРА)	0,15	104—105
Ацетон (А)	0,06	56,5	Уксусная кислота (УК)	36,49	118,1
Винилацетат (ВА)	60,1	72	Уксусный альдегид (УА)	2,36	140
Бензол (Б)	0,02	80,1	Этилидендиацетат	0,11	Свыше 150
Вода	0,09	100,0	Высококипящие	0,05	То же

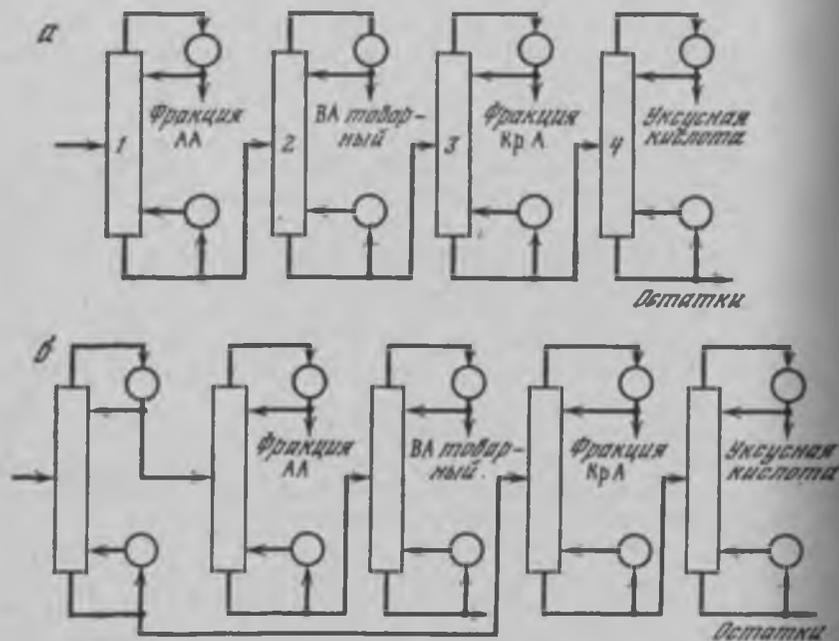


Рис. 8.22. Ректификация винилацетата-сырца на ИПО «Азот» (а) и на СПО «Азот» (б)

В мировой практике получения винилацетата технологические схемы довольно устоявшиеся. Это четырех- или пятиколонные установки, отличающиеся условиями работы первой колонны (деление смеси происходит по сечению винилацетат—бензол или вода—кротоновый альдегид). Целевыми продуктами являются винилацетат и уксусная кислота. В качестве фракций отбираются дополнительно без жестких требований на качество ацетальдегид и фракция кротонового альдегида [59].

В отечественной промышленности ректификация винилацетата-сырца производится по двум вариантам, приведенным на рис. 8.22, практически не отличающимся от зарубежных аналогов.

Разделение по первому варианту (см. рис. 8.22) более экономично по энергетическим затратам, так как винилацетат выделяется в виде дистиллята и, следовательно, отпадает необходимость в дополнительной очистке его от ингибитора и полимеров. Однако в кубовом продукте в этом случае содержатся ацетальдегид и ацетон. Их присутствие объясняется разложением этилидендиацетата с образованием уксусного ангидрида и ацетальдегида. Присутствие ацетона объясняется тем, что при высоких температурах цинкацетат (катализатор), содержащийся в сырье, разлагается с образованием ацетона. Это обстоятельство под-

тверждает целесообразность проведения процесса по второму варианту, т. е. с предварительным отбором легколетучих компонентов, включая винилацетат, на первой колонне. Это будет способствовать снижению содержания побочных продуктов в винилацетате-ректификате.

При проектировании производства винилацетата большой мощности необходимо иметь в виду, что такие побочные продукты, как ацетальдегид, ацетон и кротоновый альдегид являются важнейшими продуктами химической технологии и их выделение в качестве целевых имеет практическое значение. В связи с этим при разработке технологической схемы процесса ректификации предусмотрено выделение этих побочных компонентов в качестве целевых.

Анализ физико-химических свойств компонентов и смесей. По свойствам разделяемую смесь можно отнести к сильно неидеальным, она обладает, как и компоненты, рядом особенностей, которые необходимо учитывать при синтезе. Отдельные компоненты смеси обладают коррозионностью и склонностью к полимеризации, а смесь образует ряд гетероазетропов.

Коррозионными свойствами обладает уксусная кислота. Исследования показали, что тарелки колонн из стали Х17Н13М2Т, работающие с уксусной кислотой, через шесть месяцев работы оборудования требуют замены более 20% колпачков. Экспериментальные данные по скорости коррозии материалов при наличии в смеси уксусной кислоты приведены в [60]. Поэтому при использовании стандартного оборудования необходимо по возможности кислоту выводить из системы на ранних этапах схемы.

Полимеризация мономера винилацетата усиливается в присутствии примесей ацетальдегида, кротонового альдегида [61], а также при высоких температурах. Для предотвращения этого явления в исходную смесь добавляют стабилизатор—гидрохинон, который способен превращать активные радикалы в насыщенные соединения.

Азеотропные смеси. Анализ свойств смесей винилацетата-сырца показал, что в системе исходной смеси имеется ряд азеотропов (табл. 8.16).

Таблица 8.16

Азеотроп	Температура кипения, °С	Массовая доля первого компонента, %
Винилацетат—вода	63	93,8
Бензол—вода	69,3	70,4
Кротоновый альдегид—вода	85,2	41,4
Уксусная кислота—бензол	80,05	2,5

Поскольку содержание воды в питании незначительное и температура азеотропной смеси винилацетат—вода по сравнению с другими самая низкая, в первую очередь будет образовываться и отбираться в качестве верхнего продукта азеотроп винилацетат—вода. Данная система является гетероазеотропной с низкой взаимной растворимостью. Поэтому после расслаивания потери винилацетата с водной фазой будут незначительными ввиду малого количества последней. Однако массовая доля растворенной воды в винилацетате при 20° С составляет 0,1%. Наличие воды в винилацетате ухудшает оптические свойства полимеров. Наличие азеотропа винилацетат—вода с низкой температурой кипения приводит к тому, что в питании, по существу, появляется новый компонент — азеотроп вместо воды.

Новые технологические решения. Основными примесями непрореагировавшей уксусной кислоты являются кротоновый альдегид, винилацетат, бензол, уксусный ангидрид, этилидендиацетат. Количество их в уксусной кислоте не превышает 3,5%. Количественный анализ фазового равновесия показывает, что основным компонентом, представляющим трудность регенерации уксусной кислоты, является кротоновый альдегид. Кроме того, кротоновый альдегид является примесью, снижающей активность катализатора, и его отделение до высокой степени очистки весьма важно.

Известны различные способы очистки уксусной кислоты от примесей, например ректификация в присутствии мочевины. Однако отбор продукта снизу способствует накоплению смолистых веществ. Другие известные способы состоят в применении надсульфата, перекиси бензола или *азо-бис-изобутиронитрила* [62], однако даже с использованием дефицитных веществ не достигается необходимая степень очистки.

Представляется интересным и эффективным ведение процесса в присутствии водяного пара и с подачей азота в куб колонны, т. е. по методу азеотропно-экстрактивной ректификации. Вода образует с кротоновым альдегидом гетерогенный азеотроп с минимальной температурой кипения, что способствует гидролизу уксусного ангидрида в уксусную кислоту, а также селективно действует на относительные летучести компонентов. Азеотропная смесь отбирается сверху колонны, а уксусная кислота поступает на колонну окончательной очистки.

Выявленные ограничения физико-химического характера существенно сокращают пространство поиска оптимальной схемы. Во-первых, ввиду коррозионной способности уксусной кислоты определяется начальная вершина дерева вариантов, т. е. питание разделяется на две фракции так, что впоследствии они могут рассматриваться независимо. Фракция легколетучих компонентов содержит ацетальдегид, ацетон, винилацетат и воду, из которых целевыми продуктами являются первые три компонента,

а тяжелая фракция содержат бензол, кротоновый альдегид, уксусную кислоту, уксусный ангидрид и высококипящие компоненты. Товарными продуктами являются в этой фракции кротоновый альдегид и уксусная кислота. Что касается уксусного ангидрида, то в присутствии воды в процессе ректификации он превращается в уксусную кислоту, увеличивая выход последней, и в расчетах не рассматривается как отдельный компонент. Во-вторых, для выделения кротонового альдегида используется известное технологическое решение, эффективность которого известна заранее. Последнее обстоятельство может служить при синтезе схемы разделения тяжелой фракции граничным условием. И, наконец, из-за тяжелых примесей и склонности винилацетата к полимеризации отбор целевых продуктов желательно производить в качестве дистиллята соответствующих колонн. Выявленные ограничения вариантов схем являются основой формирования контрольного списка.

Так как легколетучая и тяжелая фракции рассматриваются независимо, имеются возможности рекуперации тепла между составляющими этих фракций. Анализ матрицы тепловых взаимодействий позволяет установить, что источниками тепла в технологических схемах с учетом ограничений, установленных на этапе исследования физико-химических свойств, могут рассматриваться потоки кротонового альдегида и уксусной кислоты, которые могут обмениваться с кубовыми продуктами следующим образом (табл. 8.17).

Таблица 8.17

Фракция	$T_{\text{кип}}, ^\circ\text{C}$	Фракция	$T_{\text{кип}}, ^\circ\text{C}$
Источник			
Кротоновый альдегид	104	Уксусная кислота	118,1
Сток			
Ацетон	50—70	Ацетон	50—70
Вода—бензол	90—95	Ацетон—винилацетат	65—70
		Ацетон—винилацетат—вода	70—80
		Винилацетат—вода	70—80

Наиболее благоприятные условия теплообмена могут быть созданы между потоками кротоновый альдегид—фракция ацетона и уксусная кислота—фракция ацетон—винилацетат—вода. Эти потоки сравнимы между собой по мощности.

Таким образом, в результате проведенного анализа и выявленных ограничений задача синтеза сводится к синтезу схем разделения двух четырехкомпонентных смесей, связь между которыми устанавливается лишь рекуперруемыми потоками.

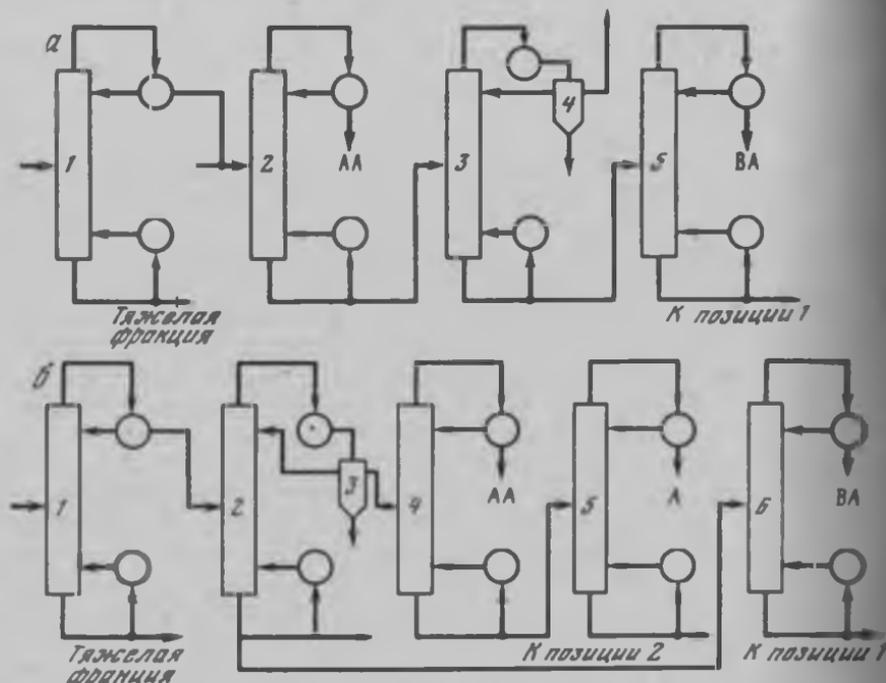


Рис. 8.23. Возможные варианты разделения легколетучей фракции

Синтез технологической схемы. Легколетучая фракция содержит следующие компоненты: ацетальдегид — товарный продукт; ацетон — фракцию, содержащую частично ацетальдегид и винилацетат; азеотропную смесь винилацетат—вода; винилацетат — товарный продукт.

Тяжелая фракция содержит бензол; кротоновый альдегид — товарный продукт; уксусную кислоту — товарный продукт; высококипящие (этилидендиацетат, стабилизатор, полимеры, следы уксусного ангидрида).

Азеотропная смесь винилацетат—вода ввиду малого количества воды в питании рассматривается в списке компонентов вместо воды.

Синтез технологических схем разделения фракций проводился согласно изложенному алгоритму с использованием эвристической оценки незавершенной части схемы. Оптимальная в смысле затрат технологическая схема разделения легколетучей фракции приведена на рис. 8.23, а с тепловым объединением кубового потока колонны 2 с дистиллятом колонны очистки уксусной кислоты. Следует заметить, что поток винилацетата по количеству является максимальным среди потоков остальных компонентов. Схема,

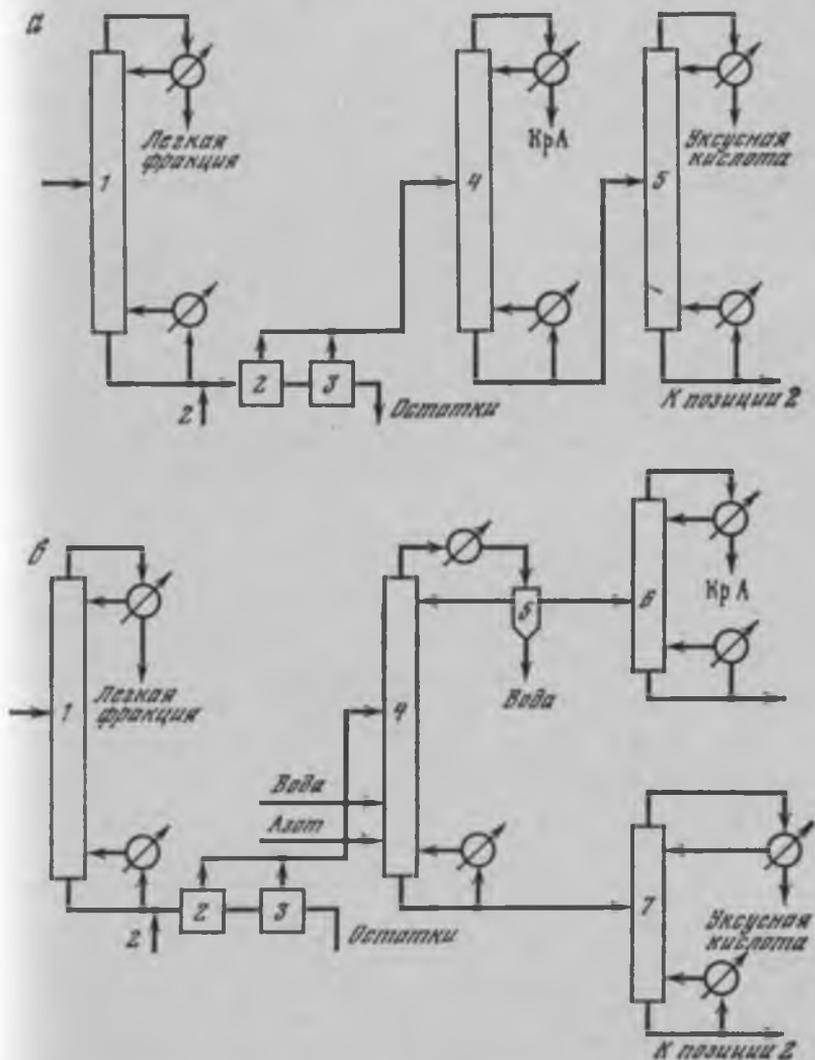


Рис. 8.24. Возможные варианты разделения тяжелой фракции

представленная на рис. 8.23, а, является прямой, причем винилацетат выделяется последним. Это приводит к тому, что колонны работают с большими нагрузками по жидкости и должны быть больших диаметров при значительных флегмовых потоках. Был синтезирован вариант схемы, представленный на рис. 8.23, б, в котором поток винилацетата отбирается на второй колонне в виде кубового продукта и в дальнейшем подвергается в допол-

нительной колонне (колонне 6) окончательной очистке. Оказалось, что в этом случае капитальные затраты несколько выше, но колонны, за исключением колонны 2, меньшего диаметра. К тому же имеется возможность реализовать тепловое объединение потоков куба колонны 5 и дистиллята кртоновой фракции, что приводит к меньшим энергетическим затратам.

Тяжелая фракция содержит два целевых продукта. При синтезе этой части технологической схемы из двух вариантов была выбрана схема, представленная на рис. 8.24, а. Наряду с ней конкурентоспособной является схема азеотропно-экстрактивного разделения кртонового альдегида и уксусной кислоты, представленная на рис. 8.24, б.

Таким образом, в результате синтеза выявлено четыре технологические схемы, среди которых и выбирался оптимальный вариант.

Основные технико-экономические показатели вариантов схем разделения легколетучей и тяжелой фракции приведены в табл. 8.18.

Таблица 8.18

Вариант	Энергетические затраты	Капитальные вложения	Потери винилацетата
Легколетучая фракция			
1	1	0,95	1,2
2	0,97	1	1,0
Тяжелая фракция			
1	1	1	1
2	0,42	0,6	0,8

Отсюда следует, что вариант схемы разделения легколетучей фракции по параллельной схеме (см. рис. 8.23, б) более выгоден за счет снижения энергетических затрат и потерь винилацетата.

Аналогичная оценка вариантов, проведенная и для схем разделения тяжелой фракции (см. рис. 8.24), свидетельствует о том, что показатели схемы регенерации уксусной кислоты азеотропно-экстрактивной ректификацией значительно лучше, чем обычной ректификацией.

Таким образом, в результате анализа вариантов схем окончательная технологическая схема состоит из второго варианта узла разделения легколетучей фракции (см. рис. 8.23, б) и второго варианта узла разделения тяжелой фракции (см. рис. 8.24, б). Полная схема с рекуперируемыми потоками приведена на рис. 8.25.

Эффективность предлагаемой схемы по сравнению с существующими обеспечивается за счет снижения энергетических зат-

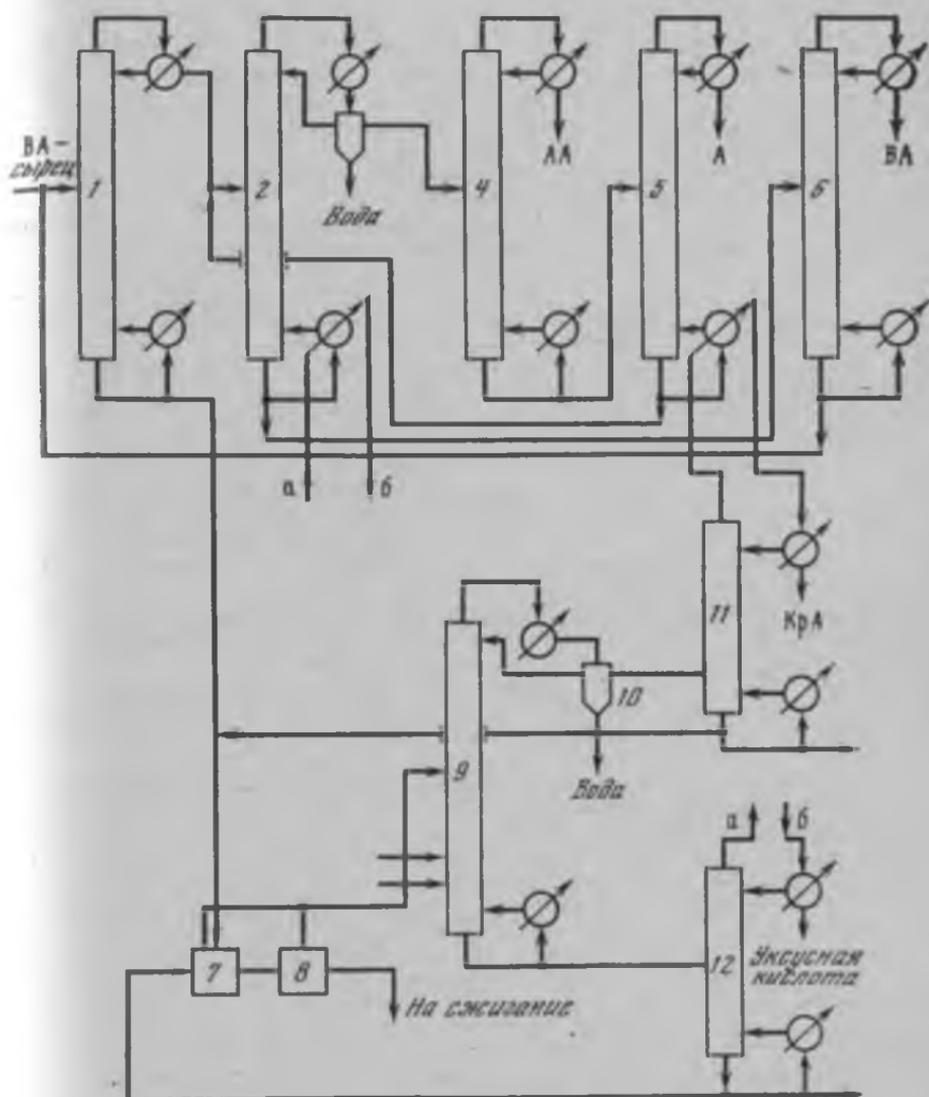


Рис. 8.25. Принципиальная технологическая схема разделения винилацетата-сырца

рат на ведение процесса вследствие рекуперации тепла продуктовых потоков, примерно на 20%, а также существенного снижения потерь винилацетата и уксусной кислоты при более четкой организации процесса и рециклических потоков. Кроме того, при такой схеме производства получают винилацетат и уксусную кислоту более высокого качества, а также товарный ацетальдегид.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Nishida N., Stephanopoulos G., Westerberg A. W.* A review of process synthesis // *AIChE Journal*. 1981. Vol. 27, N 3. P. 321—347.
2. *Menzes M. A., Johnson A. I.* Synthesis of optimal energy recovery networks using discrete method // *Canad. J. Chem. Eng.* 1972. Vol. 50, N 4, P. 290—296.
3. *Кристофидес П.* Теория графов. М.: Мир, 1978. 432 с.
4. *Нильсон Н.* Искусственный интеллект. М.: Мир, 1973. 270 с.
5. *Кафаров В. В., Мешалкин В. П., Перов В. Л.* Математические основы автоматизированного проектирования химических производств. М.: Химия, 1979. 320 с.
6. *Corey E. J., Peterson G. A.* An algorithm for machine perception of synthetically significant rings in complex cyclic organic structures // *J. Amer. Chem. Soc.* 1972. Vol. 94. P. 460.
7. *Wipke W. T., Howe W. J.* Computer-assisted organic synthesis // *ACS Symp. Ser.* 1977. Vol. 61. P. 97—127.
8. *Hendrickson J. B.* A systematic characterization of structures and reactions for organic synthesis // *J. Amer. Chem. Soc.* 1971. Vol. 93, N 25. P. 6847—6854.
9. *Hendrickson J. B.* Systematic synthesis design // *Ibid.* 1975. Vol. 97, N 20. P. 5763—5784; 5784—5800.
10. *Govind R., Powers G. J.* A chemical engineering view of reaction path synthesis: Computer assisted organic synthesis // *ACS Symp. Ser.* 1971. Vol. 61. P. 81—96.
11. *Dugundju J., Ugi I.* An algebraic model of constitutional chemistry as a basis for chemical computer programs // *Top. Curr. Chem.* 1973. Vol. 39. P. 19—64.
12. *Brandt J., Friedlich J., Gasteiger J. et al.* Computer programs for the deductive solution of chemical problems on the basis of mathematical model of chemistry computer assisted organic synthesis // *ACS Symp. Ser.* 1977. Vol. 61. P. 33—59.
13. *Agnihotri R. B., Motard R. L.* Reaction path synthesis in industrial chemistry // *Comput. Appl. Chem. Eng. ACS Symp. Ser.* 1980. Vol. 124. P. 193—206.
14. *Horeuti J.* Stoichiometrische Zahlen and die Kinetik der Chemischen Reaction // *J. Res. Inst. Catal. Hokkaido Univ.* 1957. N 15. P. 1—20.
15. *Писаренко В. И., Жукова Т. Б., Кафаров В. В.* Макрокинетика химических реакций. М.: МХТИ, 1983. 80 с.
16. *Umeda T., Itoh J., Shiroko K.* Heat exchange system synthesis // *Chem. Eng. Proc.* 1978. N 7. P. 70—78.
17. *Linhoff B., Mason D. R., Wardles I.* Understanding heat exchanger networks // *Comp. and Chem. Eng.* 1979. Vol. 3, N 1/4. P. 295—302.
18. *Ponton J. W., Donaldson R. A. B.* A fast method for the synthesis of heat exchanger networks // *Chem. Eng. Sci.* 1974. Vol. 29, N 12. P. 2378—2387.
19. *Grossmann J. E., Sargent R. W. H.* Optimum design of heat exchanger networks // *Comp. and Chem. Eng.* 1978. Vol. 2, N 1. P. 1—7.
20. *Pho J. K., Lapidus L.* Topics in computer aided design. II: Synthesis of optimal heat exchanger networks by tree searching algorithms // *AIChE Journal*. 1973. Vol. 19, N 6. P. 1182—1189.
21. *Lee K. J., Maso A. H., Rudd D. P.* Branch and bound synthesis of integrated process design // *Ind. and Eng. Chem. Fundam.* 1970. Vol. 9, N 1. P. 48—58.
22. *Sathore R. N. S., Powers G. J.* A forward branching scheme for the synthesis of energy recovery systems // *Ind. and Eng. Chem. Process. Des. and Develop.* 1975. Vol. 14, N 2. P. 175—181.
23. *Kesler M. G., Parker R. O.* Optimal network of heat exchange // *Chem. Eng. Progr. Symp. Ser.* 1969. N 92. P. 111—120.

24. *Cena V., Musturchi C., Natali F.* Synthesis of heat exchange networks. A non-iterative approach // Chem. Eng. Sci. 1977. Vol. 32, N 10: P. 1227—1231.
25. *Кафаров В. В., Мешалкин В. П., Гурьева Л. В.* Метод построения двудольного графа для формализации задач синтеза теплообменных систем как задачи оптимального назначения // Докл. АН СССР. 1979. Т. 247, № 1. С. 165—169.
26. *Flower J. R., Linhoff B. A.* Thermodynamic-combinatorial approach to the design of optimum heat exchanger networks // AIChE Journal. 1980. Vol. 26.
27. *Nishida N., Liu Y. A., Lapidus L.* Studies in chemical process design and synthesis. III: A simple and practical approach to the optimal synthesis of heat exchanger networks // Ibid. 1977. Vol. 23, N 1. P. 77—93.
28. *Linhoff B., Flower J. R.* Synthesis of heat exchanger networks. II: Evolutionary generation of networks with various criteria of optimality // Ibid. 1978. Vol. 24, N 4. P. 642—654.
29. *Linhoff B., Flower J. R.* Synthesis of heat exchanger networks. I: Systematic Generation of Energy Optimal Networks // Ibid. P. 633—642.
30. *Whistler A. M.* Heat exchangers as money makers // Petrol. Refiner. 1948. Vol. 27, N 1. P. 83—86.
31. *Umeda T., Nida K., Shiroko K.* A thermodynamic approach to heat integration in distillation systems // AIChE Journal. 1979. Vol. 25, N 3. P. 423—429.
32. *Виноград Д. Л., Алузанова Б. М., Жванецкий И. Б.* и др. Синтез схем теплообмена термодинамическим методом при наличии нескольких теплоносителей // Докл. АН СССР. 1983. Т. 268, № 4. С. 925—930.
33. *Nadgir V. M., Liu Y. A.* Studies in chemical process design and synthesis. V: A Simple heuristic method for systematic synthesis of initial sequences for multicomponent separations // AIChE Journal. 1983. Vol. 29, N 6. P. 926—934.
34. *Malone M. F., Glinos K., Marques F. E., Douglas J. M.* Simple analytical criteria for the sequencing of distillation columns // Ibid. 1985. Vol. 31, N 4. P. 683—689.
35. *Seader J. D., Westerberg A. W.* A combined heuristic and evolutionary strategy for synthesis of simple separation sequences // Ibid. 1977. Vol. 23, N 6. P. 951—954.
36. *Tedder D. W., Rudd D. F.* Parametric studies in industrial distillation. II: Heuristic optimization // Ibid. 1978. Vol. 24, N 2. P. 316—334.
37. *Stephanopoulos G., Linhoff B., Sophos A.* Synthesis of heat integrated distillation sequences // Understand Process Integr. Symp. N-West Branch Inst. Eng. Rugby. 1982. P. 111—130.
38. *Nath R., Motard R. L.* Evolutionary synthesis of separation process // AIChE Journal. 1981. Vol. 27, N 4. P. 578—587.
39. *Гальцов А. В., Майков В. П.* Термодинамически оптимальные условия многокомпонентной ректификации // ТОХТ. 1973. Т. 7, № 2. С. 170—173.
40. *Майков В. П.* Синтез оптимальной структуры ректификационных систем // ТОХТ. 1974. Т. 8, № 3. С. 435—441.
41. *Майков В. П.* Уравнения для декомпозиции ректификационных систем без рециклов // ТОХТ. 1975. Т. 9, № 1. С. 104—112.
42. *Кафаров В. В., Петляк Ф. Б.* и др. Синтез оптимальных схем ректификации многокомпонентных смесей методом динамического программирования // ТОХТ. 1975. Т. 9, № 2. С. 262—269.
43. *Кафаров В. В., Бояринов А. И.* и др. Стратегия синтеза сложных схем ректификации многокомпонентных смесей // Автоматизация химических производств. НИИТЭХИМ, 1975. Вып. 6. С. 36—41.
44. *Косунов О. А.* Синтез схем ректификации многокомпонентных смесей: Автореф. ...дис. канд. техн. наук. М.: МХТИ, 1976. 171 с.

45. *Серафимов Л. А.* Термодинамико-топологический анализ и синтез технологических схем разделения полиазеотропных смесей // Тез. XII Менделеев. съезда. Баку, 1981. М. 14—15.
46. *Петляк Ф. Б., Серафимов Л. А.* Многокомпонентная ректификация: Теория и расчет. М.: Химия, 1983. 304 с.
47. *Humphrey J. L., Fair J. R.* Low-energy separation for the process industry // *Separ. Sci. and Technol.* 1983. Vol. 18, N 14/15. P. 1765—1789.
48. *Bojanowski J. H., Hanks D. L.* Low-energy separation process // *Chem. Eng.* 1979. Vol. 86, N 10. P. 67—71.
49. *Danrigger R.* Distillation columns with vapor recompression // *Chem. Eng. Progr.* 1979. Vol. 5, N 9. P. 58—64.
50. *Rush F. E.* Energy saving alternatives to conventional distillation // 3rd Intern. Symp. Distillation. L., 1979. P. 4.1/1 — 4.1/13.
51. *Gomez A. M., Seader J. D.* Separation sequence synthesis by predictor based oriented search // *AIChE Journal.* 1976. Vol. 22, N 6. P. 970—979.
52. *Кафаров В. В., Ветозин В. Н., Стяжкин В. И.* Синтез технологической схемы разделения многокомпонентных смесей с рекуперацией тепла материальных потоков // Докл. АН СССР. 1981. Т. 258, № 3. С. 702—706.
53. *Стяжкин В. И.* Синтез схем разделения с учетом термодинамических особенностей многокомпонентных смесей. Автореф. ... дис. канд. техн. наук. М.: МХТИ, 1981. 164 с.
54. *Rathore R. W. S., Van Wormer K. A., Powers J. J.* Synthesis strategies for multicomponent separation systems with energy integration // *AIChE Journal.* 1974. Vol. 20, N 3. P. 491—502.
55. *Freshwater D. C., Zlogou E.* Reducing energy requirements in unit operations // *Chem. Eng. J.* 1976. Vol. 11, N 3. P. 215—222.
56. *Andreacovich M. J., Westerberg A. W.* A simple synthesis method based on utility bounding for heat-integrated distillation sequences // *AIChE Journal.* 1985. Vol. 31, N 3. P. 363—375.
57. *Татевосян А. В.* Системный анализ процесса ректификации многокомпонентных смесей: (На примере производства винилацетата): Автореф. дис. ... канд. техн. наук. М.: МХТИ, 1979. 209 с.
58. *Бабакон А. А.* Новые коррозионно-стойкие стали и сплавы. М.: ЦНИИчермет, 1966.
59. *Бемфорд К., Барб Ц.* и др. Кинетика радикальной полимеризации виниловых соединений. М.: Из-во иностр. лит. 1961. 347 с.
60. Патент Японии № 12858/69, кл. 16В, 1969.

Глава 9

ГИБКИЕ АВТОМАТИЗИРОВАННЫЕ ПРОИЗВОДСТВЕННЫЕ СИСТЕМЫ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

В химической технологии принято различать многотоннажные и малотоннажные производства.

Многотоннажным производствам, составляющим основу современного химического производства, свойственны непрерывная организация производства, создание агрегатов большой единичной мощности с энергозамкнутыми технологическими потоками.

Малотоннажным производствам (так называемой малой химии) свойственна периодическая (реже полунепрерывная) организация производства, многоассортиментность, частое изменение номенклатуры продукции. К малотоннажным производствам относятся производства лакокрасочных материалов, красителей и органических промежуточных продуктов, реактивов и особо чистых веществ, химико-фармацевтических препаратов, пестицидов, отдельных видов пластических масс и изделий из них, масел и смазок.

В многоассортиментных химических производствах с периодическим способом организации технологических процессов многостадийный синтез целевых продуктов осуществляется последовательно во времени в разных технологических агрегатах периодического действия, соединенных технологическими трубопроводами. Под агрегатом периодического действия (аппаратурной стадией) понимается технологический аппарат или группа аппаратов, работающих в едином, относительно самостоятельном цикле и предназначенных для выполнения определенных технологических операций.

Временная последовательность элементарных операций или их групп изображается в виде схемы или графа смены состояний каждого агрегата химико-технологической системы.

Технологический цикл аппарата, агрегата или системы — это последовательность операций от начала выпуска произвольной k -й партии продукта до начала выпуска его следующей партии $k + 1$. Цикл может иметь либо линейную структуру (простую последовательность операций), либо разветвленную (например, время окончания реакции зависит от результатов аналитического контроля). Расписание работы оборудования периодического действия принято изображать в виде временных графиков (рис. 9.1). Каждому аппарату схемы соответствует прямая линия, а стадия технологического процесса представляется отрезком прямой, длина которого соответствует продолжительности стадии. Отрезки располагаются по соответствующим прямым, а их взаимное расположение при фиксированном начале отсчета обеспечивает необходимую информацию о развитии процесса во времени.

Простейший вариант расписания работы ХТС соответствует варианту, когда каждая стадия представлена единственным аппаратом, а производство последующей партии продукта начинается только после окончания производства ее предыдущей партии (см. рис. 9.1, а). Интенсификация работы оборудования периодического действия и снижение времени его простоев достигается, если начать производить следующую партию продукта не дожидаясь окончания предыдущей (см. рис. 9.1, б). Введение в схему параллельных аппаратов меньшего размера, загруженных с равномерным сдвигом по времени, позволяет еще более «сжать» расписание работы ХТС (см. рис. 9.1, в).

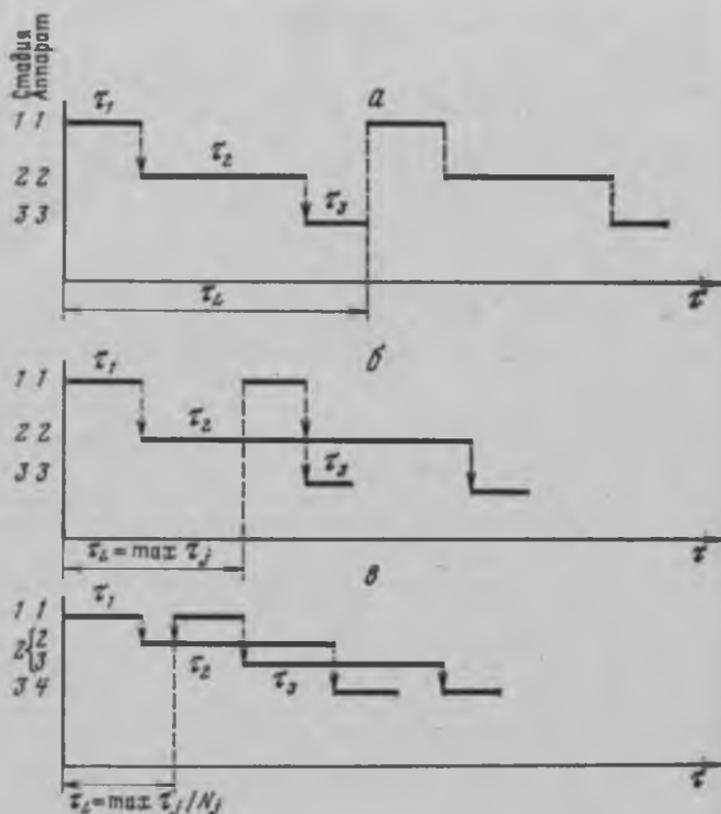


Рис. 9.4. Временные графики работы ХТС периодического действия
 а — последовательная работа ХТС; б — работа ХТС с перекрытием технологических циклов; в — работа ХТС со сложным аппаратным оформлением стадии

Замена периодических процессов непрерывными не всегда оказывается целесообразной, а иногда настолько трудно практически реализуется, что от нее приходится отказываться. Традиционно принято считать непрерывные процессы более прогрессивными главным образом благодаря более высокой производительности оборудования. Действительно, при организации производства по периодическому способу коэффициент использования оборудования снижается из-за простоев, а также из-за наличия вспомогательных операций, требующих затрат времени (загрузки реагентов, нагревания и охлаждения реакционной массы, выгрузки продукта, очистки аппаратов и т. д.).

Однако периодическим процессам присущи определенные преимущества перед непрерывными, являющиеся закономерным следствием их специфики, к которым прежде всего следует отнести

обособленность отдельных стадий в пространстве и времени, большую возможность корректировки значений технологических параметров, инвариантность стадий процесса относительно их аппаратного оформления, высокую мобильность технологической схемы, т. е. отсутствие «жестких» связей между аппаратурными стадиями. Эти свойства оказываются особенно цепными для производств с переменным ассортиментом продукции.

В многоассортиментных отраслях промышленности прогнозируется преобладание периодического способа организации технологических процессов, поэтому весьма важной проблемой является их технологическая и организационная интенсификация для повышения технико-экономической эффективности производства.

Для повышения эффективности малотоннажных многоассортиментных производств наиболее целесообразно создание гибких автоматизированных производственных систем (ГАПС). В будущем предстоит увеличить выпуск и расширить номенклатуру малотоннажной химической продукции, прежде всего продукции тонкого органического синтеза, а также заменителей растительных масел и пищевых продуктов, используемых для технических целей; кроме того, предстоит последовательно повышать организационную и технологическую гибкость производства.

ГАПС химической промышленности — это сложные производственные комплексы, ориентированные на многономенклатурную продукцию переменного ассортимента и способные быстро и с минимальными затратами ресурсов математически перестраиваться на выпуск новой продукции, переработку новых видов сырья или реализацию новых технологических процессов.

Организация производства по принципу ГАПС является одним из основных путей его интенсификации, которая достигается быстрой перестройкой производства на выпуск новой продукции, новые виды сырья; повышением качества продукции; обеспечением ритмичности работы и повышением коэффициента использования оборудования; возможностью комплексной переработки сырья; повышением надежности технологических схем; высвобождением из сферы производства значительного количества обслуживающего персонала и тем самым значительным снижением себестоимости продукции.

ГАПС получили наиболее широкое распространение в производствах с механической обработкой материалов: в инструментальной промышленности, автомобилестроении, судостроении, производстве электронных приборов и т. п. Начаты работы по созданию ГАПС и в химической промышленности.

9.1. Общесистемные свойства ГАПС

Как и любое химическое производство с непрерывным циклом, малотоннажные производства предназначены для выполнения полного технологического цикла от подготовки сырья и до получения готового продукта. Им также свойственно использование основных процессов «большой химии», таких, как реакторные, выделения продуктов и т. д. Поэтому все проблемы, присущие многотоннажным производствам и связанные с выбором способов ведения процесса, синтезом технологических схем, оптимизацией, обеспечением надежности и энергосбережения, повышением производительности и качества продуктов и т. д., имеют место и при разработке многоассортиментных производств «малой химии». Известные успехи в области математического моделирования процессов и ХТС на методологической основе системного анализа приложимы как к исследованию и проектированию отдельных аппаратов, так и технологических линий малотоннажных производств.

Однако ряд специфических особенностей малотоннажных производств накладывает определенные трудности на применение известных методов, и поэтому требуется разработка специального математического аппарата, применимого именно к этим производствам. К таким особенностям относятся мобильный, непостоянный ассортимент выпускаемой продукции; эволюционирующий тип технологической структуры; преимущественно периодический способ организации технологических процессов [1].

Мобильность ассортимента и эволюционирующий характер технологической структуры связаны с освоением новых видов продукции и снятием с производства старых, появлением новых видов сырья, изменением отдельных стадий технологического цикла получения продукта. Имея в виду, что производство обычно многостадийные, а используемое оборудование в основном обладает универсальным характером с ориентацией на проведение различных процессов, освоение новой продукции при надлежащей организации функционирования существующих производств может быть успешно решено при незначительном добавлении нового оборудования или в результате перестройки старого. Важнейшим требованием при этом является обеспечение оптимальных условий работы как отдельных аппаратов (по гидродинамике, кинетике тепломассопереноса, степени использования и т. д.), так и производства в целом (по энергетике, использованию сырья, охране окружающей среды).

Наиболее полно специфика малотоннажных многоассортиментных производств (нестационарность технологических параметров и цикличность работы аппаратов) проявляется при периодическом способе организации технологических процессов. Отдельные стадии производства изолированы друг от друга в пространстве и вре-

мени, а между технологическим процессом и аппаратом при его реализации нет взаимно однозначного соответствия, т. е. один и тот же аппарат может применяться для различных технологических процессов (естественно, при условии совпадения конструктивных и технологических параметров), а один и тот же технологический процесс может быть реализован в различных аппаратах (разных по типу, но обеспечивающих необходимые условия ведения процесса).

Итак, периодический способ организации процессов, во-первых, приводит к необходимости разработки и использования преимущественно нестационарных (динамических) моделей и, во-вторых, позволяет организовывать различного типа технологические схемы для получения заданной номенклатуры продуктов.

Нестационарность параметров приводит к определенным трудностям как при моделировании, так и непосредственно при эксплуатации производств. Трудности при моделировании непосредственно связаны с тем, что используется в основном математический аппарат дифференциальных и интегродифференциальных уравнений, решение которых сопряжено со значительными затратами машинного времени. Поэтому оперативное моделирование для прогноза поведения процесса с помощью точных моделей, основанных на дифференциальных уравнениях, не всегда возможно. Что касается эксплуатации таких производств, где время окончания стадии является основным фактором, зависящим от множества параметров процесса, то оптимальное ведение последнего требует соответствующих средств сбора, обработки и передачи информации, а также системы управления.

Периодические многоассортиментные производства по способу организации можно разделить на индивидуальные, совмещенные и гибкие.

Индивидуальная ХТС предназначена для выпуска одного целевого продукта, или, точнее, для осуществления одного технологического процесса. По структуре такая ХТС представляет собой последовательность аппаратов периодического (возможно, и полунепрерывного) действия, соединенных трубопроводами для передачи полупродуктов. Возможны ситуации, когда отдельные полупродукты являются также выходными для данного технологического процесса. Специфика проектирования индивидуальных ХТС заключается лишь в использовании нестационарных моделей, тогда как цели являются общими с непрерывными процессами (производствами).

Совмещенные ХТС предназначены для выпуска нескольких видов технологически подобной продукции фиксированного ассортимента и обычно подразделяются на последовательно совмещенные и одновременно совмещенные. В первом случае для всех продуктов имеется одинаковый маршрут, и реакционная масса при производстве любого из продуктов последовательно прохо-

дит через все процессно-аппаратные стадии ХТС. Временное совмещение заключается в последовательном запуске технологической линии на выпуск ассортиментных продуктов после окончания работы предыдущей (предыдущих) стадии. Во втором случае имеется неполная совмещенность, когда технологические маршруты имеют как совпадающие, так и различающиеся участки. Теперь уже с учетом занятости аппаратов тех или иных стадий (возможно, и при наличии избыточности аппаратов) может быть организован одновременный выпуск нескольких продуктов без изменения коммутации трубопроводов.

Гибкие ХТС ориентированы на выпуск нескольких продуктов переменного ассортимента. Такие системы имеют разветвленную сеть коммуникаций, позволяющих осуществлять быструю переориентацию на другой технологический процесс, и в большей степени соответствуют характеру многоассортиментных химических производств с часто меняющимся ассортиментом продукции.

Гибкость производственной системы может быть достигнута в простейшем случае за счет аппаратной избыточности, когда на этапе проектирования предусматривается заведомо большее количество единиц оборудования. В этом случае имеется возможность при выборе оборудования учитывать и специфику отдельных стадий, и требования надежности, и максимальное соответствие оборудования протекающим процессам. Очевидно, в этом случае требования к оборудованию будут не очень строгими. Однако с точки зрения максимального использования рабочего времени оборудования вряд ли такая система будет оптимальной.

Поэтому при проектировании ГАПС необходимо ставить вопрос о минимальной избыточности аппаратов и обеспечении их максимальной универсальности. Разработка таких систем является сложной проблемой, связанной с решением комплекса задач, а именно: выбором оборудования и трубопроводов, оптимизацией расписания работы отдельных аппаратов и системы в целом, синтезом маршрутов получения отдельных продуктов, разработкой системы управления, составлением оперативно-производственных планов. Выбор оборудования и трубопроводов представляет большие трудности при ориентации на минимальную избыточность, поскольку, во-первых, ГАПС имеет сложную систему трубопроводов, а транспортные процессы связаны с передачей веществ с различными физико-химическими свойствами и в различных агрегатных состояниях и, во-вторых, универсальность оборудования требует для его изготовления высококачественных конструкционных материалов. К тому же большие проблемы связаны с процессами очистки и переналадки оборудования. Отсюда следует важность выбора соответствующего критерия оценки эффективности работы ГАПС.

Результаты функционирования ГАПС можно оценивать по

различным показателям, в частности, по непосредственному назначению, по экономическим затратам, по устойчивости функционирования, по временным характеристикам, по адаптивности и гибкости.

Оценка по непосредственному назначению ГАПС свидетельствует о выполнении основных поставленных задач: производственных заданий по использованию сырья и других видов ресурсов, выпуска продукции высокого качества в нужных количествах, необходимой номенклатуры и в требуемые временные интервалы. Очевидно, здесь должна учитываться общая оценка работы ГАПС, включая социальные, экологические и другие аспекты.

Оценка по экономическим затратам отражает расход сырья, энергетических и материальных ресурсов на производство в целом, прибыль, приведенные затраты, капитальные и эксплуатационные затраты. Здесь же подлежат учету затраты на технические средства по сбору, обработке информации, на систему управления.

Оценка по устойчивости функционирования характеризует прежде всего надежность и устойчивость работы ГАПС в меняющихся условиях, степень синхронности работы всех звеньев основного производства и ритмичности выдачи продукции, надежность системы технического, математического, информационного и программного обеспечения. Важным является также обеспечение надежности ГАПС в смысле охраны окружающей среды, степени полезного использования вторичных материальных и энергетических ресурсов.

Оценка по временным характеристикам отражает время полезной работы производства по выпуску продукции, продолжительность непрерывной, устойчивой работы, время переналадки или перестройки (адаптации) ГАПС при изменении сырья, ассортимента продукции и т. д. В условиях периодических и многоассортиментных производств важную роль играют оценки длительности циклических процессов по выпуску продукции для отдельных единиц оборудования, технологических схем или ГАПС в целом относительно отдельного наименования или группы наименований продукции, оценки о продолжительности восстановления оборудования (очистки или промывки емкостей, реакторов и т. п.). Влажными являются также оценки о временных резервах ГАПС, выявленных в результате рациональной организации технологических процессов и досрочного выполнения плановых заданий по выпуску продукции.

Оценки по адаптивности и гибкости отражают вопросы комплексного использования сырья и других материальных и энергетических ресурсов в условиях меняющихся их поставок, комплексного использования оборудования, что увеличивает маневренность и гибкость конструируемых технологических схем, комплексного использования совмещенных и гибких технологических схем. Эти оценки дают представление об унифицированно-

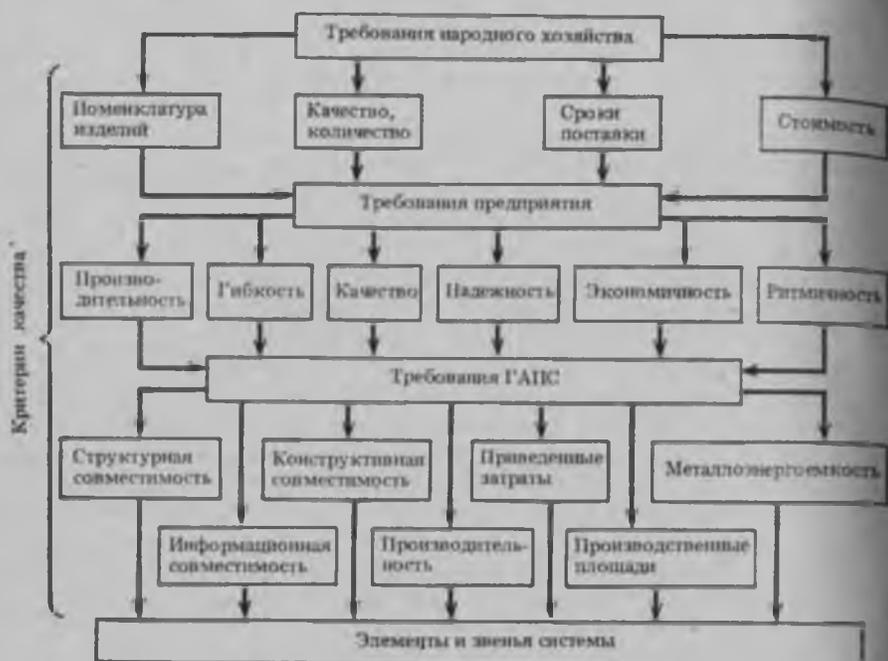


Рис. 9.2. Основные показатели (критерии качества) ГАПС

сти сырья, продукции, вторичных ресурсов, отходов производства для их дальнейшей переработки, об унифицированности оборудования, складского хозяйства, вспомогательных хранилищ, о запасах сырья, продукции и оборудования с целью обеспечения бесперебойного синхронного функционирования ГАПС в целом.

Итак, поиск оптимальной структуры ГАПС, по существу, является многокритериальной задачей оптимизации, решение которой в общем виде не представляется возможным. Поэтому чаще всего эффективность гибких схем оценивается через совокупность частных критериев, определяемых типами и количеством аппаратов, которые предполагается использовать в процессе, затратами труда при функционировании системы и временем восстановления между следующими друг за другом операциями, капитальными и эксплуатационными затратами. Аналогичным образом осуществляется оценка параметров, от которых зависит каждый из критериев (рис. 9.2).

Обоснование необходимости применения ГАПС в конкретном производстве осуществляется на основании предпроектного исследования производства, организуемого по следующей схеме (рис. 9.3).

Рис. 9.3. Основные этапы предпроектных исследований при создании ГАПС

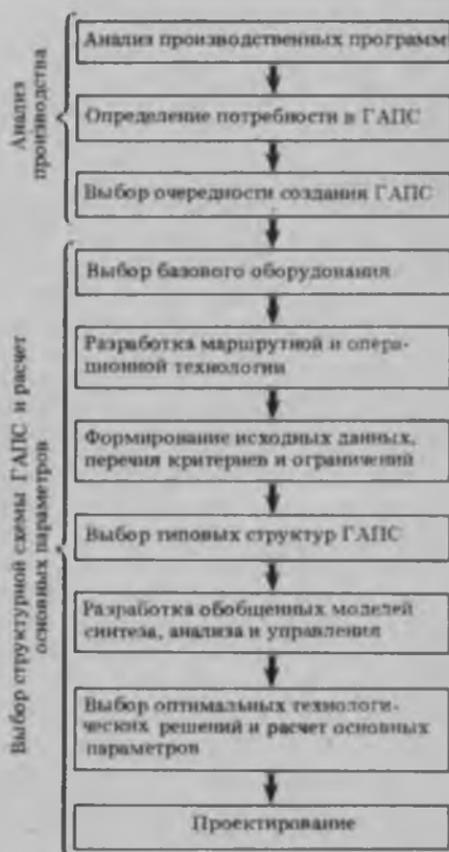
1. Сбор и анализ исходной информации для проектирования и анализа технологических процессов, исследование временных диаграмм производства продуктов проектируемого ассортимента, определение возможной аппаратурной совместимости технологических процессов, определение допустимого набора основного и вспомогательного оборудования и т. п.

2. Обоснование необходимости применения ГАПС в конкретном производстве; на этом этапе выполняется анализ эффективности внедрения ГАПС и производится оценка результатов организации конкретного производства по гибкой схеме, формируются задачи производства, которые удастся решить, внедрив ГАПС.

3. Оценка возможности различных вариантов и выполнение их сравнительного анализа.

4. Выполнение окончательной экономической оценки функционирования ГАПС, заключающееся в соизмерении затрат на ее создание и освоение и ожидаемых результатов в виде повышения производительности, качества и снижения себестоимости продукции. Наряду с экономической оценкой учитываются и другие показатели эффективности системы.

ГАПС является адаптивной системой, т. е. такой, которая при неизменном составе элементов за счет изменения их функций и формирования новой структуры связей между ними может целенаправленно менять стратегию поведения. Именно это свойство ГАПС позволяет им сохранять высокую производительность при выполнении производственного задания даже в условиях часто и нерегулярно меняющейся номенклатуры выпускаемой продукции, самостоятельно поддерживать заданные параметры производственного процесса, компенсировать внешние и внутрен-



ние возмущения (перебои в снабжении материалами, директивных смен заданий и т. д.), что и обеспечивает высокую гибкость производства. Благодаря этой гибкости появляется еще одно важное для производства качество — живучесть системы, т. е. сохранение ею работоспособности при выходе из строя отдельных звеньев или элементов.

В общей структуре химического производства ГАПС является лишь отдельной подсистемой, и поэтому ее эффективность и гибкость должны обеспечиваться в рамках всей системы. Иначе частный выигрыш может обернуться существенными потерями для большой системы. В простейшем случае гибкую автоматизированную химико-технологическую систему можно представить состоящей из двух частей: процессно-аппаратурной и информационно-управляющей (АСУТП), функционирующих совместно. При этом технологическая гибкость ХТС обеспечивается аппаратурным подобием разных технологических стадий в совокупности с периодическим способом организации технологических процессов при наличии гибких коммуникаций между аппаратами и аппаратурными стадиями. Гибкость управления заключается в том, что при переходе к производству иной продукции изменяется информационное обеспечение при минимальных изменениях программно-алгоритмического обеспечения. Свойство гибкости придается системе уже на стадии ее структурно-параметрического синтеза, включающего следующие этапы: предварительное определение минимального аппаратурного состава проектируемой ХТС, классификацию продуктов по признаку использования одинакового оборудования, определение допустимых и оптимальной технологических структур, оптимизацию аппаратурного оформления.

Гибкость периодических ХТС обеспечивается расписанием, определяющим режим работы образующих их аппаратов. Различают длительность технологической операции, время технологических циклов отдельного аппарата, стадии и ХТС в целом [1]. Время, затрачиваемое на технологический процесс i от момента начала загрузки аппарата до выгрузки, составляет время технологического цикла τ_{ij} j -го аппарата. Это время состоит из этапов загрузки, собственно технологического процесса и выгрузки. Технологический процесс в свою очередь может включать подготовительные этапы нагревания реакционной массы по определенному закону, добавления вспомогательного сырья, охлаждения реакционной массы, выдержки при определенной температуре и т. п. Время подготовки аппарата к работе и время его простоя в технологический цикл обычно не включаются. В общем случае время технологического цикла является функцией размера партии продукта, так как от объема перерабатываемой массы существенно зависит продолжительность операций загрузки, выгрузки, нагревания, охлаждения. Если стадия пред-

ставлена N_j однотипными аппаратами, включаемыми в процесс с равномерным временным сдвигом, то промежуток между началом двух следующих друг за другом операций составляет технологический цикл стадии j и определяется как

$$\tau_{ij} = \tau_{ij}/N_j. \quad (9.1)$$

Технологический цикл ХТС в целом определяется как промежуток времени между началом двух следующих друг за другом операций и равен максимальной длительности цикла стадии, т. е.

$$\tau_{iL} = \max_{R_j} [\tau_{ij}/N_j], \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (9.2)$$

где R_j — оборудование, занятое при производстве продукта i . Очевидно, τ_{iL} определяет время выпуска партии продукта i размером q_i , а для выпуска всего количества Q_i продукта i требуется время

$$T_i = (Q_i/q_i) \tau_{iL}, \quad (9.3)$$

а для выполнения планового задания по каждому продукту необходимо, чтобы выполнялось условие

$$\sum_{i \in U_j} (Q_i/q_i) \tau_{iL} \leq T, \quad (9.4)$$

где U_j — множество продуктов, производимых на оборудовании j ; T — срок эксплуатации ХТС.

Продолжительность технологического цикла аппарата определяется как сумма длительностей всех технологических операций, образующих данную процессную стадию, т. е. сумма времени химической реакции, продолжительности загрузки и выгрузки, нагревания и охлаждения и т. п., и может быть определена по известным закономерностям для данных процессов.

9.2. Математическое формулирование задачи синтеза ГАПС

В процессе исследования и проектирования ГАПС химической промышленности и для управления ими применяется широкий спектр методов кибернетики, а методологической основой анализа и синтеза ГАПС как сложных систем является системный анализ. В процессе синтеза ГАПС кроме ставшего уже традиционным метода математического моделирования широко применяются теория выбора и принятия решений, автоматическая классификация, теория графов, теория сетей и т. д. (рис. 9.4). Так как проектирование систем периодического действия возможно только с учетом способа их функционирования, то возникает необходимость в применении теории расписаний или теории массового обслуживания. Для задач структурно-параметрического синтеза, формулируемых как задачи дис-

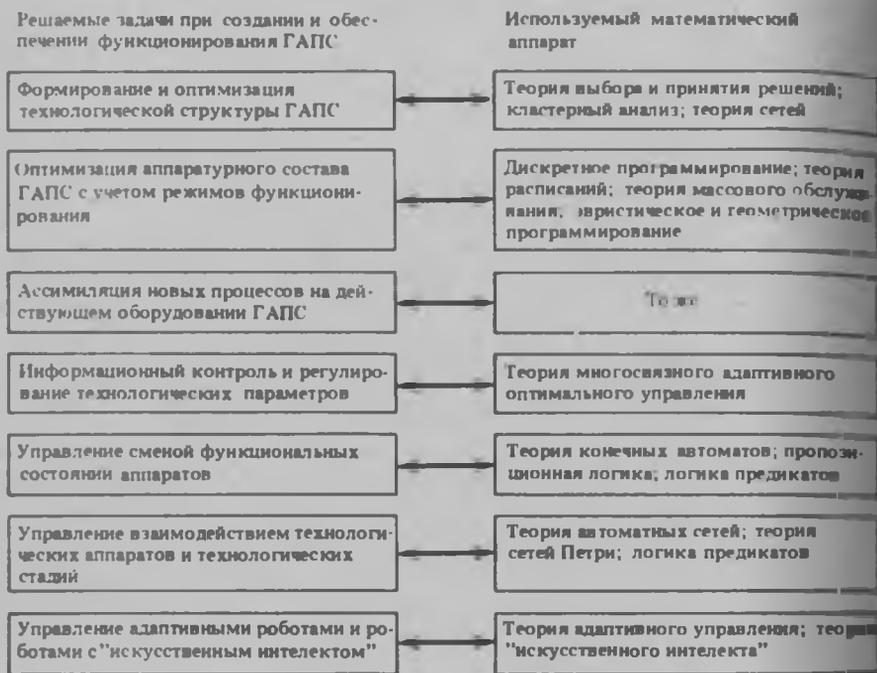


Рис. 9.4. Математический аппарат, используемый при исследовании, проектировании и управлении ГАПС

кретного нелинейного программирования, применяются эвристические алгоритмы, алгоритмы направленного поиска, анализа и отсеивания вариантов, геометрического программирования и т. п. В процессах же управления используются современная теория оптимального, адаптивного, многосвязного управления, теория конечных автоматов, динамических сетей (сетей Петри), пропозициональная логика и логика предикатов. Все эти методы применяются на различных этапах создания и обеспечения оптимального функционирования ГАПС.

Рассмотрим задачу синтеза оптимальных гибких автоматизированных химико-технологических систем периодического типа [2]. Пусть $I = \{i | i = 1, m\}$ — множество видов выпускаемой по совмещенной схеме за плановый период; $J^{(i)}$ — номера последовательно расположенных стадий, через которые проходит реакционная масса при производстве продукта i ; $J^{P(z)}$ — множество стадий, аппараты которых могут быть использованы в режиме совмещения для изготовления z видов продукции ($1 \leq z \leq m$); $J = \{j | j = 1, n\}$ — множество возможных типов оборудования проектируемой системы, равное числу перио-

дических стадий установки. Тогда

$$J = \bigcup_{i \in I} \{ (J^{(i)} / (J^{(i)} \cap J^{(p)})) \cup \{ \bigcup_{z=2}^m J_z^{p(z)} \} \}, \quad (9.5)$$

где $J^{(p)} = \bigcup_{z=2}^m J_z^{p(z)}$ — множество всевозможных типов оборудования, используемого в совмещенных режимах для выпуска более чем одного продукта.

Если принять за $P \geq 0$ вектор проектных переменных, за $R \geq 0$ — вектор параметров расписания запуска оборудования в системе, за $\varphi = \varphi(P, R)$ — вектор критериев эффективности проектируемой схемы, за Ω — множество допустимых значений векторов P и R , то рассматриваемая задача при детерминированной постановке имеет следующую общую математическую формулировку:

$$(P^*, R^*) = \text{Arg} \{ \varphi(P, R) \rightarrow \text{extrem} \mid (P, R) \in \Omega; P \geq 0; R \geq 0 \}. \quad (9.6)$$

Если все аппараты каждой стадии j имеют одинаковые объемы и конструкционные параметры, равные v_j и V_j соответственно, то векторы оптимизирующих проектных переменных и параметров расписания запуска оборудования имеют вид

$$P = \{ n_j, m_i, v_j, V_j \}, \quad j \in J^{(i)}, i \in I; \quad (9.7)$$

$$R = \{ T_{ihij}^k, T_{ihij}^n, \tau_{ij}, t_{ij} \}, \quad i \in U_{hj}, h \in N_j, j \in J^{(i)}.$$

В качестве критерия эффективности можно принять

$$\varphi = (\hat{f}_1^k, \hat{f}_2, \hat{f}_3^0, \hat{f}_4^n, \hat{f}_5^{\text{пк}}, \hat{f}_6^{\text{пр}}, \hat{f}_7^{\text{прз}}). \quad (9.8)$$

Здесь

$$\hat{f}_1^k = \sum_{j \in J} n_j \hat{f}_{1j}^k(V_j, v_j) \rightarrow \min, \quad (9.9)$$

где \hat{f}_{1j}^k — стоимость одного аппарата j -го типа, используемого на j -й стадии (конкретное выражение для \hat{f}_{1j}^k можно получить на основе анализа преискурантов оборудования);

$$\hat{f}_2 = \sum_{i \in I} \sum_{j \in J^{(i)}} \sum_{h \in N_j} \sum_{i \in U_{hj}} \hat{f}_{2ij}^0(\Theta_{ij}, \tau_{ij}, t_{ij}) \rightarrow \min, \quad (9.10)$$

где \hat{f}_{2ij}^0 — эксплуатационные затраты одного цикла с индексами i, h, i, j ; Θ_{ij} — вектор эксплуатационно-технологических параметров одного цикла по выпуску продукта i на стадии j .

Суммарное время простоев всех аппаратов схемы имеет вид

$$\hat{f}_3^0 = \sum_{i \in I} \sum_{j \in J^{(i)}} \sum_{h \in N_j} \sum_{i \in U_{hj}} \{ T_{ihij}^k - (T_{ihij}^n + P_j + \tau_{ij} + t_{ij}) \} \rightarrow \min, \quad (9.11)$$

где T_{ihij}^m , T_{ihij}^n — моменты окончания и начала технологического цикла T_{ihij} ; P_j — длительность централизованного обслуживания; τ_{ij} — длительность собственно изготовления продукции; t_{ij} — длительность индивидуального восстановления аппарата до первоначального состояния.

Резерв времени технологической схемы после всех производственных заданий, получаемый за счет оптимизации расписания работы оборудования, имеет вид

$$\hat{f}_4^R = (T - \max_{i \in I} \max_{j \in J(i)} \max_{h \in N_j} \max_{i \in U_j} \{T_{ihij}^n\}). \quad (9.12)$$

Коэффициент полезного использования оборудования схемы за счет рационального расписания ее работы имеет вид

$$\hat{f}_5^{\text{ум}} = (T - \hat{f}_3^R)/T. \quad (9.13)$$

Прирост выпуска продукции каждого вида за период T за счет рациональной организации работы оборудования имеет вид

$$\hat{f}_6^{\text{уп}} = [Q_i - Q_i]/R. \quad (9.14)$$

Приведенные затраты имеют вид

$$\hat{f}_7^{\text{уп.з}} = k [\hat{f}_1^k + \delta \hat{f}_2^a]. \quad (9.15)$$

Кроме того, на систему уравнений математического описания должны быть наложены различные ограничения.

Ограничения на проектные переменные, учитывающие целочисленный и дискретный характер некоторых переменных:

$$\prod_k (m_i - m_{ik}) = 0 \quad i \in J; \quad (9.16)$$

$$\prod_k (n_j - n_{jk}) = 0, \quad j \in J; \quad (9.17)$$

$$\prod_k (V_j - V_{jk}) = 0, \quad j \in J; \quad (9.18)$$

$$\prod_k (v_j - v_{jk}) = 0, \quad j \in J. \quad (9.19)$$

Ограничения на размер партий продуктов:

$$\begin{aligned} m_i q_i > Q_i, \quad i \in I, \quad q_i \leq n_j v_j s_{ij}^{-1} \varphi_j, \quad j \in J, \quad i \in I; \\ q_i > n_j v_j s_{ij}^{-1} \varphi_j, \quad j \in J, \quad i \in I; \end{aligned} \quad (9.20)$$

$$\sum_{h \in N_j} |U_j| = \sum_k q_i \hat{\tau}_{ij}^{-1} = m_i q_i q_{ij}^{-1} = m_i.$$

Ограничения на элементы расписания внутри каждой стадии $j \in J$:

$$T_{lhtj}^n > T_{lhtj}^n + \tau_{ij} + P_j + t_{ij}; \quad (9.21)$$

$$T_{lhtj}^n > \min_{j_1 < j} \min_{i \in N_{j_1}} \min_{r \in U_{j_1}} \{T_{rsij_1}^n\}.$$

Ограничения на элементы расписания между стадиями схемы:

$$T_{cx} = \max_{i \in I} \max_{j \in J^{(i)}} \max_{h \in N_j} \max_{l \in U_j} \{T_{lhtj}^n\} \leq T; \quad (9.22)$$

$$T_{lhtj}^n > \min_{j_1 < j} \min_{i \in N_{j_1}} \min_{r \in U_{j_1}} \{T_{rsij_1}^n\}.$$

Приведенное математическое описание ГАПС представляет собой задачу частично-целочисленного программирования.

Обобщенные задачи синтеза ГАПС в результате структуризации могут быть декомпозированы на подзадачи, которые решаются с помощью итерационных процедур, состоящих из двух этапов.

На первом этапе решается основная подзадача проектирования ГАПС при детерминированной постановке, в результате чего определяются основные квазиоптимальные варианты проектных параметров схемы (количества одинаковых и параллельно работающих аппаратов каждой стадии n_j , типоразмеров каждого аппарата), некоторых основных режимных параметров (числа и размера партий выпускаемых продуктов в целом, длительности этапов изготовления каждой партии продукта), а также выбор окончательного варианта проектируемой схемы. Как отмечалось ранее, в качестве критериев эффективности рассматриваются капитальные, основные эксплуатационные, приведенные затраты, проектная мощность схемы (возможные количества выпускаемой продукции каждого вида в отдельности и всех видов вместе), экономический эффект по сравнению с действующей схемой и др. Зависимость этих критериев эффективности от основных проектных и режимных параметров схемы определяется в моделях для проектируемой ГАПС.

Основная подзадача проектирования ГАПС, как правило, представляет собой частично целочисленную задачу нелинейного программирования большой размерности. При решении этой задачи методами целочисленного программирования встречается ряд трудностей. Поэтому целесообразней воспользоваться методом с использованием штрафных функций, заключающимся в следующем. Задача решается как непрерывная, а получаемые значения переменных округляются и затем проверяются на допустимость полученного решения. Если округленное решение является допустимым, то оно принимается в качестве целочисленного.

Алгоритм решения данной задачи приближенным методом состоит из следующих шагов.

1. Деление множества допустимых значений Ω_x на подмножества Ω_x^i .
2. Выбор начального приближения $X_0^i \in \Omega_x^i$, $i = \overline{1, n}$.
3. Выбор весового коэффициента α (коэффициента штрафа) в штрафной функции $W(X, \alpha) = F(X) + \alpha J(X)$.
4. Поиск локального оптимума методами безусловной оптимизации.
5. Повторение шагов 1—4 для новых начальных приближений $X_0^{i+1} \in \Omega_x^{i+1}$.

6. Выбор наименьшего значения критерия среди локальных минимумов функции $W(X, \alpha)$ и округление полученного решения.

7. Проверка условия допустимости решения. Если оно не выполняется, то расчеты повторяются с шага 3, иначе расчет заканчивается.

На втором этапе решается задача дальнейшего усовершенствования проектируемой схемы путем оптимизации использования оборудования. При этом решается задача оптимального расписания запуска оборудования в схеме в целом и для каждой стадии. В результате этого уточняются основные проектные параметры вспомогательного оборудования и расписания его использования. Это приводит к необходимости повторного решения задачи первого этапа.

Задачи составления оптимального расписания запуска оборудования в схеме в целом и в каждой из ее стадий сложны с вычислительной точки зрения и принадлежат к числу так называемых универсальных дискретных задач. Это означает, что они эквивалентны по сложности, например, общей задаче целочисленного линейного программирования, или «задаче о коммивояжере». В настоящее время неизвестны эффективные алгоритмы для их точного решения. Для приближенного решения задачи составления расписания для ГАПС применяется метод ветвей и границ, который заключается в следующем.

1. Задача представляется в виде дерева вариантов, вершины которого соответствуют подмножествам допустимых решений, с тем чтобы свести ее к отысканию на дереве вариантов конечной вершины, соответствующей оптимальному допустимому решению.

2. Если процедура поиска не дает возможности найти оптимальное решение за приемлемое время, необходимо ее дополнить эвристическими правилами, позволяющими исключить из рассмотрения те пути, которые с малой вероятностью ведут к оптимальному решению. В этом случае полезными оказываются следующие приемы: а) сокращение множества всех допустимых решений за счет исключения явно недопустимых последовательностей; б) сокращение множества решений за счет исключения тех после-

довательностей, которые явно не соответствуют требованиям оптимального расписания.

Проектирование совмещенных ГАПС при наличии неопределенности параметров расписания. Общая формулировка задачи имеет вид

$$F(P, R, R_{\xi}) \rightarrow \text{extrem}; \quad (P, R) \in \Omega(R_{\xi}), \quad (9.23)$$

где F — вектор критериев эффективности проектируемой схемы; P, R — векторы оптимизируемых проектных параметров и параметров расписания работы схемы соответственно; R_{ξ} — вектор неконтролируемых (неопределенных) параметров расписания; $\Omega(R_{\xi})$ — множество ограничений на контролируемые параметры P и R при конкретных значениях неопределенных параметров R_{ξ} .

Наличие неопределенных параметров расписания работы проектируемой схемы ($R_{\xi} \neq 0$) объясняется наличием внутри периода функционирования проектируемой схемы возможных колебаний внешних и внутренних производственно-технологических факторов.

Если элементы вектора случайных параметров расписания R_{ξ} подчиняются тем или иным вероятностным законам, то задача (9.23), являясь стохастической, может быть решена методами стохастического программирования или оптимизации в среднем [3].

Рассмотрим общий метод формулирования задачи (9.23) на основе применения теории массового обслуживания [4,5]. Согласно этому методу вектор случайных параметров расписания R_{ξ} приближенно заменяется вектором неслучайных усредненных характеристик μ некоторых систем массового обслуживания (СМО), в виде которых представлены проектируемая схема и ее стадии. В результате задача (9.23) заменяется следующей:

$$(P^*, R^*) = \text{Arg} \{ \Phi(P, R, \mu) \rightarrow \text{extrem}; \quad (P, R) \in \bar{\Omega}(\mu) \}; \quad (9.24)$$

$$\bar{\Omega}(\mu) = \bar{\Omega}_{\text{общ}}(\mu) \cap \Omega_{\text{СМО}}(\mu); \quad P \geq 0; \quad R \geq 0, \quad (9.25)$$

где Φ — вектор критериев эффективности проектируемой схемы, зависящих от проектных параметров P , параметров расписания R схемы, а также усредненных характеристик μ СМО, моделирующей эту схему; $\bar{\Omega}(\mu)$ — общее множество ограничений параметров P и R при заданном значении параметров μ ; $\bar{\Omega}_{\text{общ}}(\mu)$ — множество общих функциональных ограничений — зависимостей между параметрами P, R при заданном μ ; $\Omega_{\text{СМО}}(\mu)$ — множество соотношений, которые позволяют определить вектор μ из функциональных зависимостей векторов μ, P, R при учете свойств СМО, отображающих проектируемую схему и ее стадии.

Введем следующие обозначения и предположения.

Проектируемая многостадийная совмещенная схема отображается в виде многофазной СМО, число фаз которой равно числу технологических стадий в схеме.

Каждая j -я фаза СМО, являясь самостоятельной СМО, соответствует совокупности основного оборудования и вспомогательных емкостей, принадлежащей стадии j .

Для любой j -й фазы СМО характерны множество входных потоков требований, причем каждый поток i соответствует потоку партий продукта i ; множество из $N_j = \{h | h = \overline{1, n_j}\}$ — «обслуживающих каналов», соответствующих параллельно соединяемым аппаратам стадии j . В общем случае каждый h -й канал j -й фазы СМО «обслуживает» поток требования i с производительностью μ_{hij} , а производительность всей j -й фазы относительно i -го потока требований определяется суммой производительностей всех ее каналов: $\mu_{ij} = \sum_{h \in N_j} \mu_{hij}$.

Если все аппараты стадии j в проектируемой схеме однотипны и имеют одинаковые конструкционные параметры, то производительности соответствующих каналов обслуживания j -й фазы СМО равны между собой и равны $\bar{\mu}_{ij}$, тогда $\mu_{ij} = n_j \bar{\mu}_{ij}$.

При моделировании проектируемой схемы и ее стадий в виде конкретных СМО можно определить для схемы вектор усредненных характеристик эффективности

$$y = \{L_{\text{сист}}(ij); L_{\text{оч}}(ij); L_{\text{об}}(ij); W_{\text{сист}}(ij); W_{\text{оч}}(ij); W_{\text{об}}(ij)\}; \quad j \in J^{(0)}; i \in I, \quad (9.26)$$

где $L_{\text{сист}}(ij)$ — среднее число партий продукта i , находящихся в любой момент времени периода T в области стадии j , т. е. или во вспомогательных емкостях перед подачей в оборудование стадии j , или непосредственно в основном оборудовании этой стадии (это число разделяется на $L_{\text{оч}}(ij)$ и $L_{\text{об}}(ij)$); $L_{\text{оч}}(ij)$ — среднее число партий продукта i , находящихся в любой момент периода T во вспомогательных емкостях стадии j ; $L_{\text{об}}(ij)$ — среднее число партий продукта i , находящихся непосредственно в процессе изготовления в аппаратах стадии j в любой момент периода T ; $W_{\text{сист}}(ij)$ — среднее время пребывания одной партии продукта i в области стадии j ; $W_{\text{оч}}(ij)$ — среднее время пребывания одной партии продукта i во вспомогательных емкостях стадии j ; $W_{\text{об}}(ij)$ — среднее время пребывания одной партии продукта i в процессе изготовления на оборудовании стадии j .

На основе изложенного формулировка задачи (9.24) и (9.25) проектирования оптимальных схем, управления ими в условиях неопределенности имеет следующий вид.

Вектор оптимизирующих параметров задачи (9.24) и (9.25) состоит из: а) вектора проектных параметров

$$P = \{n_j, m_i, v_j, V_j, \bar{V}_{vj}\}; \quad y \in Y_j; \quad j \in J^{(0)}; \quad i \in I, \quad (9.27)$$

где v_j, V_j — объем и вектор конструкционных параметров каждого из n_j аппаратов стадии j ; m_i — число равных партий продукта i , выпускаемого в схеме; \bar{V}_{vj} — y -й объем вспомогательной стадии j ; б) вектора оптимизируемых параметров

$$R = \{T_{lhi}^h, T_{lhi}^k\}, \quad l \in U_{lhi}; \quad h \in N_j; \quad j \in J^{(i)}, \quad i \in I, \quad (9.28)$$

где T_{lhi}^h, T_{lhi}^k — моменты начала и окончания каждого технологического цикла с индексами l, h, i, j [2].

Вектор критериев эффективности задачи (9.24) и (9.25) имеет вид

$$\Phi(y, P, R) = \{F_1^K(P), F_2^O(P, R, y)\}. \quad (9.29)$$

Здесь F_1^K — величина капитальных затрат основного оборудования и вспомогательных емкостей в проектируемой схеме:

$$F_1^K = \sum_{j \in J} n_j f_{1j}^K(v_j, V_j) + \sum_{j \in J} \sum_{y \in Y_j} a_{yj} \bar{V}_{vj}^b, \quad (9.30)$$

где f_{1j}^K — стоимость одного аппарата стадии j ; F_2^O — величина эксплуатационных затрат на основное оборудование и вспомогательные емкости в схеме:

$$F_2^O = \sum_{i \in I} \sum_{j \in J^{(i)}} \sum_{h \in N_j} \sum_{l \in U_{lhi}} f_{lhi}^o(W_{об}(ij), L_{об}(ij)) + \\ + \sum_{k \in I} \sum_{y \in Y_j} \sum_{i \in I_y} \bar{f}_{iyj}^o(W_{оч}(ij), L_{оч}(ij)), \quad (9.31)$$

где f_{lhi}^o — эксплуатационные затраты одного аппарата при выполнении им одного цикла с индексами l, h, i, j ; \bar{f}_{iyj}^o — эксплуатационные затраты одной вспомогательной емкости y стадии j при временном хранении полуфабрикатов емкости продукта i .

Общее множество ограничений $\bar{\Omega}_{общ}(y)$ задачи (9.24) и (9.25), наложенных на проектные параметры и параметры расписания при фиксированных значениях усредненных характеристик, состоит из следующих групп ограничений.

Группа ограничений, отражающих требования целочисленности и дискретности проектных переменных:

$$\hat{P}_s \in \left\{ \bar{P}_s \mid \prod_k (\hat{P}_s - \bar{P}_{sk}) = 0; \quad \forall s = 1, 2, \dots \right\}, \quad (9.32)$$

где \bar{P}_s — s -й проектный параметр; $\bar{P}_{sk} > 0$ — k -е стандартное значение s -го проектного параметра.

Группа ограничений на параметры расписания внутри каждой j -й стадии схемы, которая состоит из: а) соотношений для определения длительностей технологических циклов работающих

аппаратов при выпуске продукции:

$$T_{lhi}^n = T_{lhi}^n + W_{об}(ij); W_{об}(ij) \geq 0; l \in U_{hi}; h \in N_j; \\ j \in J^{(i)}; i \in I; \quad (9.31)$$

б) соотношений, отражающих очередь централизованной разгрузки аппаратов каждой стадии j :

$$X_s^h = \{0, 1\}; \\ (M_j^* + M[\hat{P}_j])(1 - X_s^h) + T_{lhi}^n - T_{rsz}^n \leq M[\hat{P}_j] + \\ + W_{об}(z) - W_{об}(ij); \\ (M_j^* + M[\hat{P}_j])X_s^h + T_{lhi}^n - T_{rsz}^n > M[\hat{P}_j] + \\ + W_{об}(z) - W_{об}(ij); \\ M_j^* = \max_{i \in I} \max_{h \in N_j} \{M[\hat{t}_{hi}] + M[\hat{P}_j] + M[\hat{t}_{hi}]\}; \quad (9.34) \\ l \in U_{hi}; r = U_{sz}; (h, s) \in N_j; h \neq s; (i, z) \in I, i \neq z; j \in J,$$

где P_j — длительность этапа централизованной разгрузки одного аппарата стадии j ; X_s^h — вспомогательные переменные.

Группа ограничений на параметры расписания между стадиями проектируемой схемы, которые отражают: а) последовательность маршрутов процессов выпуска продукции между стадиями:

$$T_{lhi}^n \geq \min_{j_1 < j} \min_{s \in N_{j_1}} \min_{r \in U_{sl}} \{T_{rsi}^n\}; \quad (9.35)$$

$$l \in U_{hi}; h \in N_{j_1}; (j_1, j) \in J^{(i)}; i \in I,$$

где запись $j_1 < j$, $(j_1, j) \in J^{(i)}$ означает, что продукт i по своему технологическому маршруту изготавливается в стадии j_1 раньше, чем в стадии j ; б) условие выполнения всех производственных заданий в установленный срок:

$$\max_{i \in I} \max_{j \in J^{(i)}} \max_{h \in N_j} \max_{l \in U_{hl}} (T_{lhi}^n) \leq T. \quad (9.36)$$

Группа функциональных зависимостей между проектными параметрами P , параметрами расписания R и вектором усредненных характеристик μ , которая состоит из: а) соотношений, являющихся математическим описанием технологических стадий процессов выпуска всех видов продукции:

$$\Phi_{ij}(V_j, v_j, \mathcal{D}_{ij}, W_{об}(ij)) = 0, j \in J^{(i)}, i \in I, \quad (9.37)$$

б) условий выбора размера партий выпускаемых видов продукции с учетом требования выполнения задания выпуска:

$$m_{qi} \geq Q_i, i \in I, \quad (9.38)$$

с учетом наличия оборудования с ограниченным объемом:

$$q_i \leq n_i v_i \bar{\alpha}_{ij}^{-1} \bar{\Phi}_j, \quad (9.39)$$

$$q_i \geq n_i v_i \bar{\alpha}_{ij}^{-1} \bar{\Phi}_j, \quad j \in J^{(i)}, i \in I,$$

в) соотношений для определения величин производительности оборудования стадий при выпуске каждого продукта i :

$$\mu_{ij} = n_j \bar{\mu}_{ij} = n_j (\tau_{ij} + P_j + t_{ij})^{-1}, \quad (9.40)$$

$$j \in J^{(i)}, i \in I,$$

г) условий выбора объема вспомогательных емкостей [2]:

$$\bar{V}_{vj} \leq K_3 \left(\sum_{i \in I_y} L_{oc}(ij) q_i \bar{\gamma}_{ij} \right) (\bar{q}_y^{(2)})^{-1}; \quad (9.41)$$

$$\bar{V}_{vj} \geq K_3 \left(\sum_{i \in I_y} L_{oc}(ij) q_i \bar{\gamma}_{ij} \right) (\bar{q}_y^{(1)})^{-1}, \quad y \in Y_j; j \in J.$$

Группа соотношений, отражающих зависимости между усредненными характеристиками проектируемой схемы, состоящая из: а) ограничений на накопление реакционных масс во вспомогательных емкостях:

$$L_{oc}(ij) \leq R_{ij}, \quad j \in J^{(i)}, i \in I, \quad (9.42)$$

где R_{ij} — верхнее допустимое количество партии полуфабрикатов продуктов i , временно хранящихся в емкостях перед их подачей в оборудование стадии j ; б) соотношений взаимосвязи между усредненными характеристиками схемы (формулы Литтла):

$$W_{сист}(ij) = L_{сист}(ij) \lambda_{ij}^{-1};$$

$$W_{об}(ij) = L_{об}(ij) \lambda_{ij}^{-1}; \quad (9.43)$$

$$W_{oc}(ij) = L_{oc}(ij) \lambda_{ij}^{-1}; \quad j \in J^{(i)}, i \in I,$$

где λ_{ij} — параметр интенсивности поступления партий продукта i на стадию j .

Рассмотрим вопрос о построении множеств ограничений $\bar{\Omega}_{jcmo}$ (9.25) для конкретных случаев, когда каждая стадия схемы представляется в виде простейших СМО [5]. Если для потоков партий продукции на входе в схему в целом и на ее стадиях характерны: а) стационарность, которая заключается в том, что вероятность появления любой совокупности k партий продукции в схеме или на ее стадии за фиксированный промежуток времени τ не зависит от времени; б) отсутствие последствия (т. е. вероятность поступления k любых партий продукции за промежуток времени τ не зависит от порядка поступления партий продукции в схему или на ее технологические стадии до этого промежутка времени); в) одинарность (т. е. вероятность поступления более одной партии

продукции в схему или ее группы оборудования в один и тот же период времени пренебрежимо мала), то эти потоки являются простейшими. Простейший поток — это стационарный пуассоновский поток. Если все потоки событий, переводящие систему из одного состояния в другое, являются пуассоновскими, то для этих систем вероятности состояний описываются с помощью системы обыкновенных дифференциальных уравнений.

В задачах анализа СМО в качестве основных показателей функционирования системы могут быть использованы вероятность простоя каналов обслуживания P_0 ; вероятность того, что в системе находится n требований P_n ; среднее число требований, находящихся в системе (в сфере обслуживания):

$$L_{\text{сист}} = \sum_{n=1}^{\infty} n P_n; \quad (9.44)$$

среднее число требований, находящихся в очереди в емкости:

$$L_{\text{оч}} = \sum_{n=N_K}^{\infty} (n - N_K) P_n; \quad (9.45)$$

среднее время ожидания требований в очереди $\tau_{\text{оч}}$; среднее время обслуживания требований в системе $\tau_{\text{сист}}$; среднее число свободных каналов обслуживания

$$N_{\text{св}} = \sum_{n=0}^{N_K-1} (N_K - n) P_n; \quad (9.46)$$

среднее число занятых каналов обслуживания

$$N_{\text{зк}} = \sum_{n=1}^{N_K} n P_n. \quad (9.47)$$

Пусть исследуется производственный процесс, в котором средняя интенсивность потока заявок равна

$$\lambda_{ij} = \lambda_i = m_i/T, \quad j \in J^{(i)}, \quad i \in I, \quad (9.48)$$

где m_i — число партий продукта i , выпускаемого в течение периода T , а длительность каждого цикла любого аппарата стадии j при выпуске одной партии продукта i подчиняется показательному закону распределения случайных величин с одинаковым показателем $\bar{\mu}_{ij}^{-1}$. Тогда средняя длительность одного цикла аппарата стадии j по выпуску продукта i равна

$$\bar{\tau}_{ij} = \bar{\mu}_{ij}^{-1}, \quad j \in J^{(i)}, \quad i \in I, \quad (9.49)$$

а производительность стадии j по выпуску продукта i равна

$$\mu_{ij} = n_j \bar{\mu}_{ij} = n_j \bar{\tau}_{ij}^{-1}. \quad (9.50)$$

Величина приведенной интенсивности поступления потока продукта i на стадию j , которая определяет среднее число партий продукта i , приходящих на стадию j за среднее время технологического процесса изготовления одной партии этого же продукта, имеет вид

$$\rho_{ij} = \lambda_{ij} / \mu_{ij} = m_i \bar{\tau}_{ij} / (T n_j). \quad (9.51)$$

Условие, гарантирующее выполнение свойства стационарности работы схемы, а также ее стадий j ($j \in J$), заключается

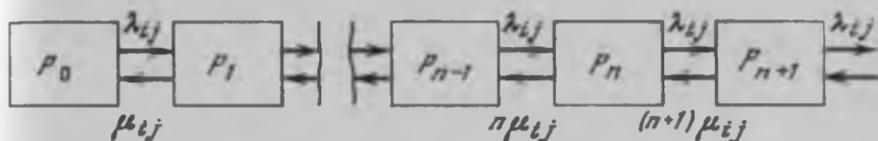


Рис. 9.5. Граф состояний

в том, чтобы приведенная интенсивность всех потоков партий продукции ρ_{ij} относительно всех технологических стадий была меньше единицы:

$$\rho_{ij} = (m_i / T n_j) \bar{\tau}_{ij} < 1, \quad j \in J^{(i)}, \quad i \in I. \quad (9.52)$$

Если через $M[\bar{\tau}_{ij}^0]$, $M[t_{ij}]$, а также $M[\hat{P}_j]$ обозначить математические ожидания удельных величин длительности этапов собственно изготовления и восстановления, а также этапа централизованной разгрузки оборудования для изготовления продукта i на стадии j , тогда среднюю длительность одного цикла аппарата любой стадии можно определить как

$$\bar{\tau}_{ij} = (M[\tau_{ij}^0] + M[t_{ij}]) q_i + M[\hat{P}_j]. \quad (9.53)$$

Различают следующие случаи моделирования стадии j проектируемой схемы в виде конкретных СМО.

1. Моделирование стадии j при выпуске продукта i в виде многоканальной СМО с ожиданием [5]. Это означает, что любая партия полуфабриката продукта i в момент прихода к стадии j будет принята на изготовление, если имеется свободный аппарат. В противном случае эта партия реакционной массы временно хранится во вспомогательной емкости с ограниченным количеством хранимых партий, равным R_{ij} , $0 < R_{ij} < \infty$.

Для построения математической модели необходимо составить размеченный граф состояний (рис. 9.5). Тогда построение математической модели означает составление системы обыкновенных дифференциальных уравнений вероятностей состояний. Для установившегося режима работы СМО эта система представляет собой

систему алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} \frac{dP_0(t)}{dt} &= -P_0(t)\lambda_{ij} + P_1(t)\mu_{ij} = 0; \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{dP_n(t)}{dt} &= P_{n-1}(t)\lambda_{ij} - (\lambda_{ij} + n\mu_{ij})P_n(t) + (n+1)\mu_{ij}P_{n+1}(t) = 0. \end{aligned} \quad (9.54)$$

Решение этой системы уравнений и представляет собой моделирование рассмотренной СМО: а) среднее число партий продукта i , находящихся в емкости стадии j , равно

$$L_{оч}(ij) = \sum_{l=n_j+1}^{n_j+R_{ij}} (l-n_j) \rho_{ij}^l \bar{P}_{0ij} (n_j! n_j^{l-n_j})^{-1}; \quad (9.55)$$

б) среднее число партий продукта i , находящихся в оборудовании стадии j , равно

$$L_{об}(ij) = \rho_{ij} \bar{P}_{0ij} [(1 - \rho_{ij} n_j^{-1})^{-1} \rho_{ij}^n (n_j!) + \sum_{l=0}^{n_j-1} \rho_{ij}^l (l!)^{-1}]; \quad (9.56)$$

в) общее число партий продукта i , находящихся в районе стадии j , равно

$$L_{сист}(ij) = L_{оч}(ij) + L_{об}(ij). \quad (9.57)$$

Здесь \bar{P}_{0ij} — вероятность того, что при выпуске продуктов i все аппараты будут свободны, равная

$$\bar{P}_{0ij} = \left(1 + \sum_{l=1}^{n_j} \frac{\rho_{ij}^l}{l} + \sum_{l=n_j+1}^{n_j+R_{ij}} \rho_{ij}^l (n_j! n_j^{l-n_j})^{-1} \right)^{-1}. \quad (9.58)$$

2. Моделирование стадии j при выпуске продукта i в виде СМО с бесконечной длиной очереди. Это эквивалентно случаю 1 с учетом того, что вспомогательная емкость стадии j может хранить сколько угодно большое число партий продукта i ; $R_{ij} = +\infty$. Тогда, поступая аналогично случаю 1, получим основные усредненные характеристики стадии j при выпуске продукта i : а) среднее число партий продукта i , находящихся во вспомогательной емкости стадии j , равно

$$\begin{aligned} L_{оч}(ij) &= \sum_{l=n_j+1}^{\infty} (l-n_j) \bar{\Phi}_{lij} = \bar{\Phi}_{0ij} \rho_{ij}^n (n_j!) \sum_{l=1}^{\infty} l \rho_{ij}^l (n_j!)^{-1} = \\ &= (n_j)^n (n_j!)^{-1} \bar{P}_{0ij} [\rho_{ij} n_j^{-1}]^{n+1} [1 - \rho_{ij} n_j^{-1}]^{-2}; \end{aligned} \quad (9.59)$$

б) среднее число партий продукта i , находящихся на изготовлении в оборудовании стадии j , равно

$$\begin{aligned} L_{об}(ij) &= \rho_{ij} \bar{P}_{0ij} [(1 - \rho_{ij} n_j^{-1})^{-1} \rho_{ij}^j (n_j!)^{-1} + \sum_{l=0}^{n_j-1} \rho_{ij}^l (l!)^{-1}] = \\ &= \rho_{ij} \bar{P}_{0ij} [n_j (n_j - \rho_{ij})^{-1} \rho_{ij}^j (n_j!)^{-1} + \sum_{l=0}^{n_j-1} \rho_{ij}^l (l!) + \rho_{ij}^j (n_j!)^{-1} - \\ &- \rho_{ij}^j (n_j!)^{-1}] = \rho_{ij} \bar{P}_{0ij} \bar{P}_{0ij}^{-1} = \rho_{ij} \end{aligned} \quad (9.60)$$

в) среднее число партий продукта i , находящегося в районе стадии j , определяется по соотношению (9.57); г) вероятность простоя всех аппаратов стадии j при выпуске продукта i равна

$$\begin{aligned} \bar{P}_{0ij} &= (1 + \sum_{l=1}^{n_j} \rho_{ij}^l (l!)^{-1} + \sum_{l=n_j+1}^{\infty} \rho_{ij}^l (n_j! n_j^{l-n_j})^{-1})^{-1} = \\ &= \sum_{l=0}^{n_j} \rho_{ij}^l (l!)^{-1} + \rho_{ij}^{n_j+1} (n_j! (n_j - \rho_{ij})^{-1})^{-1}. \end{aligned} \quad (9.61)$$

3. Моделирование стадии j при выпуске продукта i в виде СМО с отказами. Это означает, что при переходе от оборудования предыдущих стадий к оборудованию стадии j для продукта i не предусмотрены вспомогательные емкости (т.е. $R_{ij} = 0$), тогда каждая партия продукта i либо будет принята сразу на изготовление, если имеется хотя бы один свободный аппарат в стадии j , либо должна покинуть эту стадию, если все аппараты заняты. В последнем случае соответствующая партия продукта i либо откладывается, либо отправляется к другой (возможной по технологическому маршруту) стадии. Тогда аналогично случаям 1 и 2 основные усредненные характеристики стадии j при выпуске продукта i , моделируемой в виде СМО с отказом, определяются по соотношениям: а) среднее число партий продукта i , находящихся в емкости стадии j , равно

$$L_{оч}(ij) = 0; \quad (9.62)$$

б) среднее число партий продукта i , находящихся в районе стадии j , равно среднему числу этих партий, находящихся в процессе изготовления:

$$L_{смт}(ij) = L_{об}(ij) = \bar{P}_{0ij} \sum_{l=1}^{n_j} \rho_{ij}^l ((l-1)!)^{-1}; \quad (9.63)$$

в) вероятность того, что все аппараты стадии j будут свободны, равна

$$\bar{P}_{0ij} = (1 + \sum_{l=1}^{n_j} \rho_{ij}^l (l!)^{-1})^{-1}. \quad (9.64)$$

4. Моделирование стадии j , состоящей из одного аппарата ($n_j = 1$), в виде СМО с одним каналом обслуживания. Имеет смысл рассмотреть только одноканальную СМО с ожиданием. Пусть каждая партия продукта i , поступая на стадию j , будет либо сразу принята на изготовление, либо находиться во вспомогательной емкости до тех пор, пока не освободится оборудование этой стадии ($R_{ij} \geq 0$). Тогда основные усредненные характеристики стадии j при выпуске продукта i определяются следующим образом: а) среднее число партий продукта i , находящихся во вспомогательной емкости стадии j , равно

$$L_{\text{оч}}(ij) = \left(\sum_{l=1}^{\infty} (l-1) \rho_{ij}^l \right) (1 - \rho_{ij}) = \rho_{ij}^2 (1 - \rho_{ij})^{-1}; \quad (9.65)$$

б) среднее число партий продукта i , находящихся в районе стадии j , равно

$$L_{\text{сист}}(ij) = 1 - \rho_{ij} \sum_{l=1}^{\infty} l \rho_{ij}^l = \rho_{ij} (1 - \rho_{ij})^{-1}; \quad (9.66)$$

в) среднее число партий продукта i , находящихся в оборудовании стадии j , равно

$$L_{\text{об}}(ij) = L_{\text{сист}}(ij) - L_{\text{оч}}(ij) = \rho_{ij}; \quad (9.67)$$

г) вероятность того, что оборудование стадии j будет освобождено, равна

$$\bar{P}_{0ij} = 1 + \sum_{l=1}^{\infty} \rho_{ij}^l = 1 - \rho_{ij}. \quad (9.68)$$

На основе соотношений (9.55)–(9.68) можно получить общий вид множества функциональных ограничений, определяющих свойство многофазной СМО, моделирующей проектируемую схему в задаче (9.23). Пусть множества технологических стадий $J^{(i)}$, предназначенных для изготовления продукта i , разбивается на непересекающиеся подмножества,

$$J^{(i)} = J_1^{(i)} \cup J_2^{(i)} \cup J_3^{(i)} \cup J_4^{(i)}, \quad (9.69)$$

где $J_1^{(i)}$ соответствует стадиям схемы в виде многоканальных СМО с бесконечной очередью (случай 1: $n_j > 1$; $0 \leq R_{ij} \approx \infty$); $J_2^{(i)}$ — стадиям схемы в виде многоканальных СМО с конечной длиной очереди (случай 2: $n_j > 1$; $R_{ij} = 0$); $J_3^{(i)}$ — стадиям схемы в виде многоканальных СМО без очереди или СМО с потерями, СМО с отказами (случай 3: $n_j > 1$; $R_{ij} = 0$); $J_4^{(i)}$ — стадиям схемы в виде одноканальных СМО с бесконечной длиной очереди (случай 4: $n_j = 1$; $R_{ij} \geq 0$). Тогда множество соотношений для определения всех характеристик (усредненных) проектируемой схемы относи-

тельно продукта i имеет вид

$$\Omega_{i/СМО}^{(i)} = \left\{ \bigcup_{j \in J_1^{(i)}} [\text{уравнения (9.55)} \dots (9.58)] \bigcup \right. \\ \left. \bigcup_{j \in J_2^{(i)}} [(9.59) \dots (9.61)] \right\} \bigcup \left\{ \bigcup_{j \in J_3^{(i)}} [(9.62) \dots (9.64)] \right\} \bigcup \\ \bigcup_{j \in J_4^{(i)}} [(9.65) \dots (9.68)], \quad (9.70)$$

а множество соотношений для определения усредненных характеристик проектируемой схемы относительно всех продуктов имеет вид

$$\Omega_{i/СМО} = \bigcap_{i \in I} \Omega_{i/СМО}^{(i)}. \quad (9.71)$$

Следует заметить, что в случае СМО в общей постановке усредненные характеристики практически невозможно получить аналитически, а необходимо применение методов имитационного моделирования.

9.3. Синтез совмещенных схем для производства пентафталевых эмалей ПФ-115 в лакокрасочной промышленности

Лакокрасочная промышленность является типичным примером многоассортиментного периодического производства с многостадийной технологией и многоцелевым назначением аппаратов отдельных стадий.

Основными стадиями производства являются: а) загрузка сырья; б) собственно изготовление продукции; в) отделение продуктов от примесей, регенерация растворителей; г) слив готовой продукции в тару и упаковку.

Собственно изготовление продукции представляет собой либо процесс смешения, либо диспергирования пигментных паст для получения смесей — суспензий эмалей.

Оборудование для процесса диспергирования может состоять из шаровых мельниц, трех валковых краскотерочных бисерных или песочных машин.

Для процесса смешения используются смесители различных емкостей и замесочные машины. Все оборудование производства можно разбить на группы, каждая из которых характеризуется рядом признаков, таких, как операция, выполняемая аппаратом; объем аппарата; наличие обогрева или охлаждения; тип и скорость вращения мешалки; материал футеровки и шаров (для шаровых мельниц).

Аппараты принадлежат к одной группе, если не отличаются друг от друга своими технико-экономическими показателями и продукция, изготовленная в одном из них, может быть изготовлена в любом другом.

Задача синтеза оптимальной ГАПС состоит в проектировании технологической схемы для производства 16 видов пентафталевых эмалей ПФ-155. Исходные данные на проектирование, в том числе годовая программа по выпуску эмалей ПФ-115, представлены в табл. 9.1.

Технологический процесс выпуска ПФ-115 состоит из четырех стадий: закатка лака в дисольвер, загрузка пигментов и диспергирования смеси в дисольвере; диспергирование пигментов в бисерной машине; составление эмалей в колеровочном смесителе; центрифугирование эмалей.

Прежде всего необходимо определить время τ_{ij} , необходимое для переработки продукта i массой q_i на j -й стадии в одном аппарате.

Первая стадия: $\tau_{i1} = \tau$ закатки лака + τ загрузки пигмента + τ диспергирования + τ восстановления, где τ загрузки равно $4,75 \cdot 10^{-3} q_i \eta_{1i}$; η_{1i} — доля пигмента в i -м продукте на единицу i -го продукта (см. табл. 9.1). Примем, что τ закатки лака + τ восстановления + τ диспергирования (0,5 ч). Тогда $\tau_{i1} = 0,5 + 4,75 \cdot 10^{-3} q_i \eta_{1i}$.

Вторая стадия. Время диспергирования пигментов в бисерной мельнице МПД-50 для типового лакокрасочного производства (ЛКП) рассчитывается по формуле $\tau_{i2} = 50 q_i \eta_{2i} / (z_2 \text{Пр}_i)$, где z_2 — варьируемый объем бисерной машины (оптимизирующая переменная); Пр_i — производительность МПД-50 по i -му продукту (см. табл. 9.1); q_i — масса партии i -го продукта (оптимизирующая переменная); η_{2i} — доля потока i -го продукта, перерабатываемого на второй стадии (см. табл. 9.1).

Третья стадия. Примем, что $\tau_{i3} = 3$ ч для $i = \overline{1,16}$.

Четвертая стадия. Имеем $\tau_{i4} = q_i \eta_{4i} / \text{Пр}$ для $i = \overline{1,16}$, где производительность центрифуги $\text{Пр} = f(d)$; d — диаметр камеры центрифуги; η_{4i} — доля потока на единицу i -го продукта (см. табл. 9.1).

Для расчета капитальных и эксплуатационных затрат были получены соответствующие регрессионные уравнения.

Первая стадия. Уравнение для расчета стоимости дисольвера Ц_1 в зависимости от объема V_1 : $\text{Ц}_1 = 99,8 V_1^{0,312}$ (погрешность 7,2%). С учетом затрат на электроэнергию, охлаждающую воду, зарплату и капитальные затраты на здание и оборудование выражение для расчета приведенных затрат на первой стадии имеет вид

$$Z_1 = 0,4524 (99,8 V_1^{0,312}) n_1 + 0,77 \sum_{i=1}^{16} m_i \tau_{i1}$$

где m_i — число партий продукта i ; $i = \overline{1,16}$; n_1 — число параллельно работающих дисольверов.

Таблица 9.1

Номер продукта i	Цвет анализ 11Ф-115	Q, г/топ	Группа	η_{1i}	η_{2i}	η_{3i}	$\text{Pr}_i^{(40)}, \text{вт/ч}$
1	Белая пень	200	I	0,22	0,7305	1,035	200
2	Слоновая кость	300		0,31	0,680	1,034	200
3	Белый	400		0,29	0,6611	1,035	200
4	Песочная	480		0,32	0,6644	1,036	110
5	Желтая	450	II	0,23	0,6272	1,035	110
6	Красно-оранжевая I	670		0,40	0,5920	1,036	110
7	Красно-оранжевая II	720		0,40	0,5920	1,035	110
8	Красная	520		0,21	0,7283	1,037	110
9	Вишневая	650	III	0,12	0,8314	1,034	110
10	Коричневая	580		0,18	0,7426	1,035	110
11	Светло-зеленая I	400		0,35	0,6400	1,034	170
12	Светло-зеленая II	600		0,35	0,6400	1,33	170
13	Темно-зеленая I	580	IV	0,34	0,6500	1,036	170
14	Темно-зеленая II	750		0,34	0,6500	1,035	170
15	Синяя	510		0,23	0,7515	1,036	100
16	Черная	600		0,05	0,8888	1,037	100

Вторая стадия. Аналогичным образом рассчитываются капитальные и эксплуатационные затраты на данной стадии. Полученное выражение для приведенных затрат имеет вид

$$Z_2 = (150 + 14,74z_2^{1,35})n_2 + 46,55 \sum_{i=1}^{16} \frac{n_2 q_i m_i}{z_2 G_i}$$

Третья стадия (колеровка эмалей). На этой стадии приведенные затраты вычисляются по выражению $Z_3 = 0,57 + 0,4524 S_3 + 0,06 N_3$, где S_i — стоимость i -го аппарата в стандартном ряду; N_i — мощность i -го аппарата.

Для стандартного ряда после аппроксимации методом наименьших квадратов получены зависимости стоимости S_3 и мощности N аппарата от объема V (m^3) для оборудования из стали: нержавеющей $S_3 = 1450 V_3^{0,770}$ (погрешность 5,2%); эмалированной $S_3 = 1860 V_3^{0,770}$ (погрешность 3%); углеродистой $S_3 = 2100 V_3^{0,811}$ (погрешность 6,3%). Мощность оборудования из стали всех трех видов $N = 1,25 V_3^{1,00}$ (погрешность 12%). Тогда для оборудования из нержавеющей стали приведенные затраты на третьей стадии равны:

$$Z_3 = 0,4524 (1450) V_3^{0,773} n_3 + 0,06 n_3 (1,25 V_3),$$

где n_3 — число параллельно работающих смесителей; m_i — число партий продукта i , изготавливаемых на третьей стадии.

Четвертая стадия (центрифугирование). Пусть используются центрифуги универсальные ОГШ (ГОСТ 20-730-75). По методу наименьших квадратов получены зависимости стоимости S_4 и производительности центрифуг (Пр) от диаметра барабана d (m^2):

$$S_4 = 12342,57 d^{0,74} \text{ (погрешность 3,7\%);}$$

$$\text{Пр} = 7717,90 d^{1,93} \text{ (погрешность 0,1\%).}$$

После расчета капитальных и эксплуатационных затрат получено следующее выражение для приведенных затрат:

$$Z_4 = 0,4524 n_4 (12342,57 d^{0,74}) + \frac{0,584 n_4 \sum_{i=1}^{16} q_i m_i}{7717,90 d^{1,93}}$$

На рис. 9.6 приведена информационная схема модулей расчета перечисленных выше стадий изготовления всех видов ПФ-эмалей.

В качестве критерия эффективности рассматриваются длительность циклов изготовления продукта i , величины капитальных, эксплуатационных и приведенных затрат относительно периода T , которые определяются в модулях в зависимости от регламентированных, а также от оптимизирующих параметров: размеров пар-



Рис. 9.6. Информационная схема расчета производства ПФ-эмалей

тий, основных конструкционных и проектных параметров оборудования всех стадий в проектируемой схеме.

Математическое описание задачи описывается в виде функционала

$$\begin{aligned}
 F(\bar{X}) = & 0,4524 (1223,2 + 448,1X(33)) X(37) + \\
 & + 0,77X(37) \sum_{i=1}^{16} \tau_{i1} X_{i+16} + (103,4X(34) - \\
 & - 2167,2) X(38) + 0,931X(38) \sum_{i=1}^{16} \tau_{i2} X_{i+16} + \\
 & + 0,4524 (495 + 448,1X(35)) X(39) + \\
 & + 0,02 (1,75 + X(35) - 0,79) X(39) \sum_{i=1}^{16} \tau_{i3} X_{i+16} + \\
 & + 0,4524 (2353 + 10229X(36)) X(40) + \\
 & + 0,584X(40) \sum_{i=1}^{16} \tau_{i4} X_{i+16}. \quad (9.72)
 \end{aligned}$$

Ограничения на число партий ($X(17) \dots X(32)$) и соответственно на размер партий ($X(1) \dots X(16)$) определяется исходя из годового плана выпуска продуктов $Q(i)$, наименьшего из значений производительности Pr_{\min} (для определения нижнего предела \underline{X}) и наибольшего из значений производительности Pr_{\max} (для определения верхнего предела \bar{X}) аппаратов стандартного ряда, используемых в проектируемой схеме (табл. 9.2), см. с. 553).

Итак, ограничения на проектные переменные имеют вид:

$$\begin{aligned}
 50 < X(1) \dots X(16) < 3000 & \text{— количество партий продуктов;} \\
 66 < X(17) < 1334 & \\
 100 < X(18) < 2000 & \\
 133 < X(19) < 2667 & \\
 160 < X(20) < 3200 & \\
 150 < X(21) < 3000 & \\
 223 < X(22) < 4467 & \\
 140 < X(23) < 4800 & \\
 173 < X(24) < 3467 & \\
 216 < X(25) < 4334 & \\
 193 < X(26) < 2867 & \\
 133 < X(27) < 2667 & \\
 200 < X(28) < 4000 & \\
 193 < X(29) < 3867 & \\
 250 < X(30) < 5000 & \\
 170 < X(31) < 3400 & \\
 200 < X(32) < 4000 & \\
 1,0 < X(33) < 2,5 & \text{— объем дисольвера, м}^3; \\
 50 < X(34) < 140 & \text{— объем бисерной мельницы, м}^3; \\
 1,0 < X(35) < 2,5 & \text{— объем колеровочного смесителя, м}^3; \\
 0,35 < X(36) < 0,8 & \text{— диаметр барабана центрифуги, м;} \\
 1 < X(37) \dots X(40) < 25 & \text{— число параллельно работающих дисольверов,} \\
 & \text{бисерных мельниц, колеровочных смесителей и центрифуг соответственно.}
 \end{aligned} \tag{9.73}$$

Ограничения на фонд рабочего времени:

$$\begin{aligned}
 \frac{\tau_{i-1}}{X(37)} + \frac{\tau_{i-2}}{X(38)} + \frac{\tau_{i-3}}{X(39)} + \frac{\tau_{i-4}}{X(40)} & \leq \frac{5500}{X(i+16)}, \quad i = \overline{1,16}; \\
 \sum_{i=1}^{16} \tau_{i-1} X(i+16) & \leq 5500 X(37); \\
 \sum_{i=1}^{16} \tau_{i-2} X(i+16) & \leq 5500 X(38); \\
 \sum_{i=1}^{16} \tau_{i-3} X(i+16) & \leq 5500 X(39); \quad \sum_{i=1}^{16} \tau_{i-4} X(i+16) \leq 5500 X(40).
 \end{aligned} \tag{9.74}$$

Ограничения на выполнение плана:

$$X(i) \geq Q(i)/X(i+16), \quad i = \overline{1,16}. \tag{9.75}$$

Ограничения на заполнение аппаратов:

$$\begin{aligned}
 0,3X(33) & \leq \frac{\eta_2(i) X(i)^1}{\rho_1} \leq 0,8X(33), \quad i = \overline{1,16}; \\
 0,3X(35) & \leq \frac{\eta_2(i) X(i)}{\rho_2} \leq 0,8X(35), \quad i = \overline{1,16};
 \end{aligned}$$

$$0,3 \frac{X(34) \text{Pr}_i}{50} \leq \eta_2(i) X(i) \leq \frac{X(34) \text{Pr}_i}{50}, \quad i = \overline{1,16}; \quad (9.76)$$

$$0,3(18038X(36) - 4579) \leq \eta_1(i) X(i) \leq 0,8(18038X(36) - 4579).$$

Выражения (9.72) — (9.76) представляют математическую формулировку задачи проектирования оптимальных ГАПС для типового ЛКП.

Эта задача характеризуется большой размерностью и целочисленностью оптимизируемых переменных. Для ее решения был использован метод, изложенный ранее.

В результате расчетов получены следующие значения переменных. Проектные параметры:

$$X(37) = 1, \quad V = 1 \text{ м}^3; \quad X(38) = 5, \quad V = 100 \text{ л};$$

$$X(39) = 8, \quad V = 2 \text{ м}^3; \quad X(40) = 3, \quad d = 1 \text{ м};$$

$$X(40) = 2, \quad d = 1 \text{ м}.$$

Показатели эффективности основного проекта квазиоптимальной схемы производства эмалей ПФ-115 приведены в табл. 9.3. Увеличение проектной мощности — 5,055 %.

Таблица 9.2

Параметр	Номер продукта i							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Годовой план Q_i , т	200	300	400	480	450	670	720	520
Минимальная производительность Pr_{min} , кг/ч	200	200	200	110	110	110	110	110
Максимальная производительность Pr_{max} , кг/ч	560	560	560	308	308	308	308	308
$\frac{X}{X}$	66	100	133	160	150	223	140	173
	1334	2000	2667	3200	3000	4467	4800	3467
Параметр	Номер продукта i							
	9	10	11	12	13	14	15	16
Годовой план Q_i , т	650	580	400	600	580	750	510	600
Минимальная производительность Pr_{min} , кг/ч	110	110	120	170	170	170	100	100
Максимальная производительность Pr_{max} , кг/ч	308	308	336	476	476	476	280	280
$\frac{X}{X}$	216	193	133	200	193	250	170	200
	4334	3867	2667	4000	3867	5000	3400	4000

Таблица 9.3

Номер продукта i	Число партий m_i	Размер партии $q_i, \text{т}$	Оптимальная длительность этапов выпуска $\tau_{ij}, \text{ч}$			
			1	2	3	4
1	69	3,004	3,63	5,46	3	0,0592
2	203	3,0011	4,93	5,10	3	0,0592
3	136	3,006	4,64	4,95	3	0,0592
4	168	3,024	5,09	9,12	3	0,0596
5	152	3,014	3,79	8,56	3	0,0594
6	230	2,997	6,19	8,03	3	0,0592
7	253	2,975	6,15	7,97	3	0,0586
8	173	3,002	3,49	9,90	3	0,0592
9	217	2,995	2,20	11,20	3	0,0589
10	198	2,984	3,05	10,0	3	0,0588
11	133	3,015	5,51	5,65	3	0,0593
12	209	2,991	5,47	5,61	3	0,0588
13	194	2,997	5,33	5,71	3	0,0591
14	258	2,982	5,31	5,67	3	0,0587
15	172	2,990	3,76	11,1	3	0,0589
16	205	2,984	1,20	13,2	3	0,0589

Итого 2970 партий.

Результаты составления оптимального расписания выпуска эмалей ПФ-115 приведены в табл. 9.4, где указаны очередь следования продуктов в схеме; оптимальное время изготовления продуктов на стадиях схемы $T_{сх}$; моменты начала $T_i^н$ и окончания $T_i^к$ выпуска каждого из продуктов; общая длительность пролеживания каждого из продуктов $T_{1-2}^{продолж}$ во вспомогательных емкостях между первой и второй стадиями.

Рассмотрим в качестве моделирования стадии колеровки эмалей ПФ-115 синтезируемой схемы в виде многоканальной СМО с очередью. Интенсивность изготовления (обслуживания) рассчитывается как наименьшее по продуктам значение μ_i (для данного примера $i = 1$):

$$\mu = \mu_1 = \frac{Q_1}{q_1 \tau_1} = \frac{20000}{3004 \cdot 249,6} = 0,26666 \text{ партий/ч,}$$

где Q_1 — годовой выпуск первого продукта; q_1 — размер партии первого продукта; τ_1 — время изготовления первого продукта. Интенсивность поступления партий на изготовление рассчитывается следующим образом:

$$\lambda = \frac{\sum_{i=1}^M m_i}{T_0} = \frac{2971}{5421} = 0,547974 \text{ партий/ч,}$$

Таблица 9.4

Периоды выпуска продукции	Номер продукта i	Время выпуска на стадиях, ч				Параметры расписания, ч			
		1	2	3+4	T_i^H	T_i^R	T_{1-2}^R	$T_{сх}$	
1	16	84,210	538,36	102,43	0,0	722,06	0,0	722,06	
2	9	458,44	490,31	109,73	81,21	1219,66	379,92	1138,45	
3	5	189,05	257,73	76,45	239,65	1444,10	681,18	1204,45	
4	10	190,25	397,10	99,35	428,70	1864,06	739,66	1435,36	
5	8	204,78	350,59	89,63	627,95	2294,93	931,97	1576,98	
6	15	229,55	395,62	89,05	832,74	2690,00	1062,00	1767,30	
7	4	283,40	306,64	85,60	1053,30	2903,23	1174,26	1849,94	
8	7	525,65	414,13	129,27	1336,70	3338,05	955,25	2021,36	
9	6	471,22	369,36	116,09	1862,34	3714,23	895,16	1851,89	
10	14	455,77	293,60	130,02	2333,56	4021,76	898,75	1088,20	
11	12	378,54	234,63	105,38	2789,30	4231,74	723,81	1442,41	
12	13	342,85	221,11	97,91	3167,87	4445,45	615,60	1277,60	
13	2	330,85	206,26	102,55	3510,72	4656,34	505,90	1145,61	
14	11	244,34	151,09	67,95	3841,60	4772,60	467,80	931,23	
15	3	210,34	135,45	69,34	4085,90	4909,65	408,57	823,74	
16	1	84,70	76,43	35,57	4296,25	4952,70	459,33	656,45	

Таблица 9.5

Параметр	Номер продукта i							
	1	2	3	4	5	6	7	8
Годовой план выпуска, т	200	300	400	480	450	670	720	520
Время изготовления τ_i , ч	249,6	358,12	276,6	523,5	375,7	398,3	482,6	316,0
Размер партии, т	3,004	3,001	3,006	3,024	3,014	2,997	2,975	3,002
Число партий	69	203	136	168	152	230	253	173

Параметр	Номер продукта i							
	9	10	11	12	13	14	15	16
Годовой план выпуска, т	650	580	400	600	580	750	510	600
Время изготовления τ_i , ч	519,3	287,7	228,6	470,6	313,6	579,6	354,1	252,7
Размер партии, т	2,995	2,984	3,015	2,991	2,997	2,981	2,990	2,984
Число партий	217	198	133	209	194	258	172	205

где $\sum_{i=1}^M m_i$ — общее число партий продуктов; T_{ϕ} — фактическое время изготовления всех продуктов. Исходные данные для расчета μ и λ приведены в табл. 9.3—9.5.

Если принять, что колебание поступления полупродуктов на вход в систему подчиняется пуассоновскому закону распределения, то согласно выражениям (9.59)—(9.61) математическое описание многоканальной СМО для стадии колеровки имеет следующий вид: а) вероятность простоя каналов обслуживания

$$P_0 = \left[\sum_{n=0}^{N-1} \frac{(2,054899)^n}{n!} + \frac{(2,054899)^N}{N! (1 - 2,054899/N)} \right]^{-1}; \quad (9.77)$$

б) среднее число требований, находящихся в очереди,

$$N_{оч} = \sum_{n=N}^{\infty} (n - N) \frac{(2,054899)^{n-N} (2,054899)^N}{N^{n-N} N!} P_0; \quad (9.78)$$

в) среднее время ожидания в очереди

$$t_{оч} = \frac{N_{оч}}{0,547974}; \quad (9.79)$$

г) среднее число свободных каналов обслуживания

$$N_{\text{св}} = \sum_{n=0}^{N-1} (N-n) \frac{2,054899}{n!} P_0, \quad (9.80)$$

д) вероятность нахождения в системе n требований

$$P_n = \frac{(2,054899)^n}{N^{n-N} N!} P_0. \quad (9.81)$$

Результаты расчета по выражениям (9.77)—(9.81) для различных значений $N = 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8$ приведены в табл. 9.6.

Таблица 9.6

Число сме- стелей (кана- лов обслужи- вания)	Вероятность проста каналов P_0	Вероятность нахождения в системе n требований P_n	Среднее чис- ло партии в очереди (в емкости) $N_{\text{оч}}$	Среднее время ожидания $t_{\text{оч}}, \text{ч}$	Среднее число загруженных каналов, $N_{\text{заг}} =$ $= N - N_{\text{св}}$
2	0,06015	0,14514	—	—	1,75610
3	0,10773	0,02349	0,33874	0,61816	2,00663
4	0,12327	0,00328	0,09675	0,17660	2,04817
5	0,12705	0,00045	0,02706	0,04940	2,05396
6	0,12788	0,00006	0,00696	0,01220	2,05477
7	0,12806	0,000008	0,00163	0,00298	2,05488
8	0,12809	0,000001	0,00035	0,00064	2,05449

Полученные результаты показывают адекватность предложенной модели СМО для описания стадий технологических схем многоассортиментных периодических химических производств (для детерминированной модели $N = 5$).

ЛИТЕРАТУРА

1. Макаров В. В. Математическое моделирование периодических процессов в систем химической технологии. М.: МХТИ, 1984. 48 с.
2. Кафаров В. В., Ветохин В. П., Игуен Суан Игуен, Игуен Хуу Тунг. Математическая формулировка задач синтеза оптимальных совмещенных схем многоассортиментных периодических химических производств// ТОХТ. 1986. Т. 20. № 4. С. 526—534.
3. Лифшиц А. Л., Мальц Э. А. Статистическое моделирование систем массового обслуживания. М.: Сов. радио, 1978. 248 с.
4. Карфман А., Крюон Р. Массовое обслуживание. М.: Мир, 1965. 302 с.
5. Ивченко Г. И., Каштанов В. А., Коваленко И. И. Теория массового обслуживания. М.: Высш. шк., 1982. 255 с.

ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ САПР ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

Глава 10 СИСТЕМА

АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ПРОИЗВОДСТВ НЕФТЕХИМИЧЕСКОЙ И НЕФТЕПЕРЕРАБАТЫВАЮЩЕЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ (САПР «НЕФТЕХИМ»)

Системы автоматизированного проектирования все в большей мере рассматриваются в отрасли как одно из основных средств интенсификации инженерного труда проектировщиков и повышения технико-экономических показателей промышленных производств. Разработке и использованию САПР в отрасли уделяется большое внимание. С 1982 г. начали действовать первые очереди САПР, во ВНИПИНефти и Гипрокаучуке. С 1985 г. введены в эксплуатацию САПР в ряде проектных институтов нефтепереработки и основного органического синтеза, синтетического каучука, шинной промышленности [1]. Для управления и методического руководства работами по САПР в отрасли при ВНИПИНефти создан специализированный научно-технический центр по САПР (СНТЦ САПР). В нем организованы подразделения по координации и методическому руководству работами по САПР в отрасли, специализированное отделение отраслевого фонда алгоритмов и программ по автоматизированному проектированию. При СНТЦ САПР действует совет главных конструкторов САПР проектных институтов. СНТЦ САПР взаимодействует с НИИ отрасли по созданию методического обеспечения решения проектных задач, с Термодинамическим центром НПО «Масма» — по информационному и методическому обеспечению расчета теплофизических свойств веществ, с отраслевыми лабораториями Минвуза СССР — по разработке отдельных проблем САПР.

10.1. Состав и структура САПР «Нефтехим»

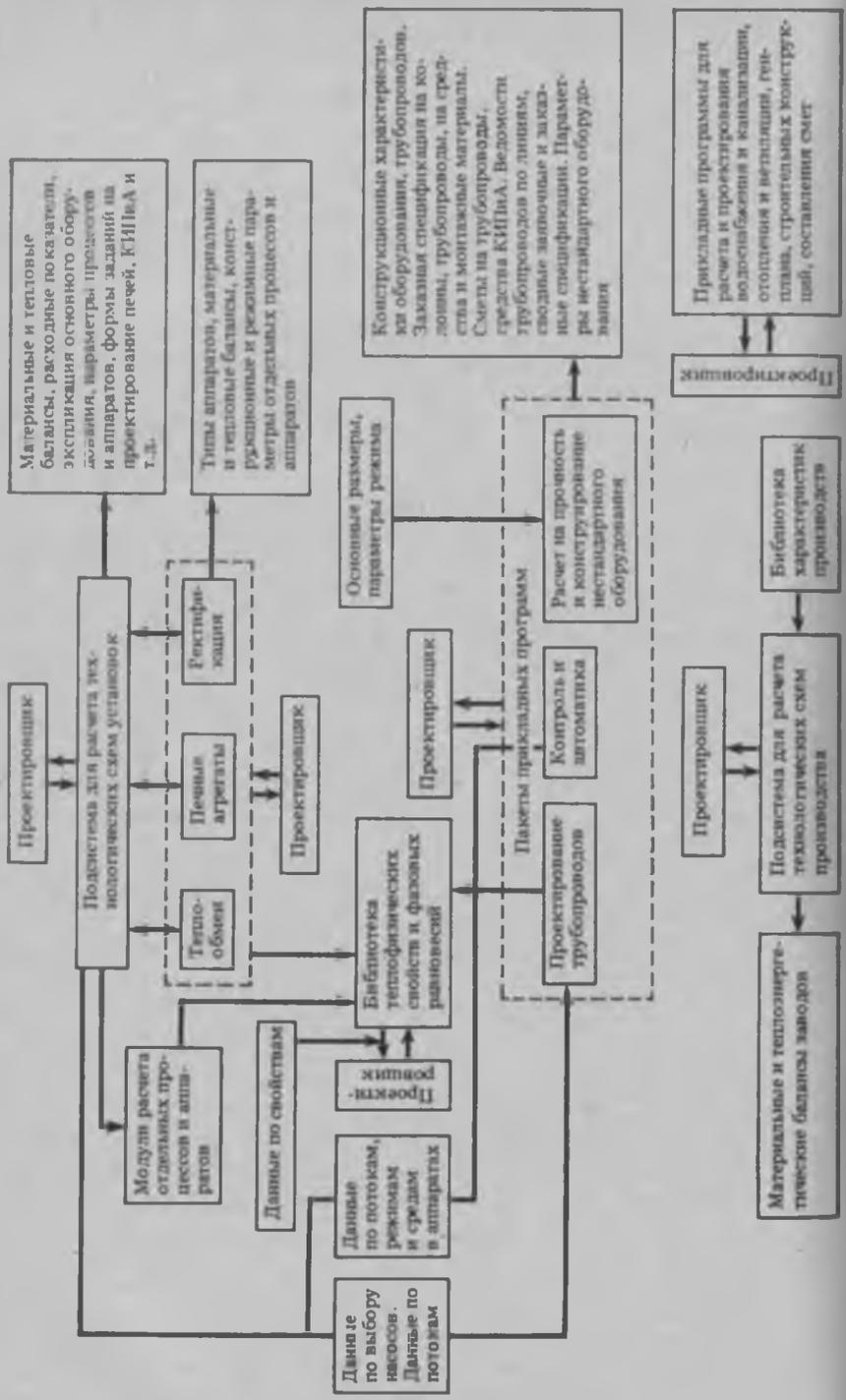
САПР «Нефтехим» — человекомашина система, предназначенная для выполнения проектной документации строящихся и реконструируемых промышленных производств, проведения расчетных исследований, оценивающих перспективные направления развития технологии и оборудования.

Цель создания САПР — улучшение технико-экономических показателей проектируемых производств, сокращение трудозатрат на проектирование, сроков проектирования, повышение качества проектно-сметной документации за счет использования математических методов и ЭВМ. От традиционной системы проектирования САПР отличают применяемые средства, иное организационное и техническое обеспечение связей между решаемыми задачами.

САПР производств нефтепереработки и нефтехимии характеризуется: наличием необходимых средств для решения всего комплекса задач, возникающих при проектировании, на современном научно-техническом уровне; поэтапным созданием программных средств с внедрением промежуточных результатов; максимально возможным и целесообразным использованием предыдущих разработок и локализацией изменений средств, заключающейся в том, что изменения отдельных элементов не должны приводить каждый раз к изменению всей системы; наличием нормативной базы проектирования; наличием информационного фонда, отражающего характер окружающей среды (т. е. современного состояния проблемы); наличием связи со всеми источниками информации, определяющими состояние окружающей среды и ее развитие; средствами, обеспечивающими максимальное удобство общения главного звена системы (инженера-проектировщика) со средствами автоматизации; возможностью многоуровневого решения задач проектирования с определением числа уровней, необходимых средств решения, оценок и ограничений в зависимости от задачи проектирования и хода ее решения; возможностью декомпозиции решения задач проектирования и определения последовательности их решения в зависимости от основной задачи проектирования и имеющихся средств методического, информационного и другого обеспечения; возможностью расширения и обновления [2].

Как проектирующая система САПР «Нефтехим» на первых этапах разработки имела структуру, аналогичную структуре проекта производства. Первая очередь системы предусматривала автоматизацию отдельных этапов проектирования в существующем процессе разработки проекта. При этом функции САПР определялись исходя из необходимости автоматизации наиболее часто решаемых и трудоемких задач проектирования, наличия методических разработок, степени подготовленности разработчиков и проектировщиков. Принципиальная функциональная схема первой очереди САПР приведена на рис. 10.1.

Применительно к производствам первичной переработки нефти, гидрокрекинга, каталитического крекинга, алкилирования, газофракционирования и др. САПР позволяет решать следующие задачи: расчет материальных и топливно-энергетических балансов нефтеперерабатывающих заводов; расчет материальных и теп-



Материальные и тепловые балансы, расходные показатели, эксплуатация основного оборудования, параметры процессов и аппаратов, формы заданий на проектирование печей, КИПиА и т.д.

Технические характеристики оборудования, трубопроводов, средства и монтажные материалы. Смета на трубопроводы.

Основные размеры, параметры режима

Библиотека теплофизических свойств и фазовых равновесий

Расчет на прочность и конструирование нестандартного оборудования

Данные по потокам, режимам и средам в аппаратах

Проектировщик

Пакеты прикладных программ

Контроль и автоматика

Библиотека характеристик производства

Библиотека характеристик производства

Подсистема для расчета технологических схем производства

Материальные и теплоэнергетические балансы заводов

Проектировщик

ловых балансов установок по заданным конструкционным и режимным параметрам процессов; приближенные расчеты материальных балансов установок; расчет материальных и тепловых балансов установок с выбором основного оборудования по заданным ограничениям на параметры выходных и промежуточных потоков с получением проектной документации; оптимальный расчет фрагментов технологических схем; оптимальный синтез систем теплообмена для сред, не изменяющих своего агрегатного состояния; проверочные, проектно-проверочные расчеты ректификации нефтяных и углеводородных смесей в простых колоннах и с несколькими вводами сырья, выносными отпарными секциями; абсорбции; реакторных процессов; печных агрегатов и т. д.; расчет, выбор и составление заказных спецификаций по трубопроводным системам, насосам, компрессорам; расчет на прочность и устойчивость колонных аппаратов, сосудов и аппаратов под давлением; составление смет на технологическое оборудование, общестроительные и сантехнические работы; расчеты технологических схем заводов; составление спецификаций и смет на оборудование и материалы КИПиА; отдельные работы по инженерным частям проекта (архитектурно-строительная, электроснабжение, отопление и вентиляция, водоснабжение и канализация, генплан).

Для решения указанных задач в системе используются следующие подсистемы.

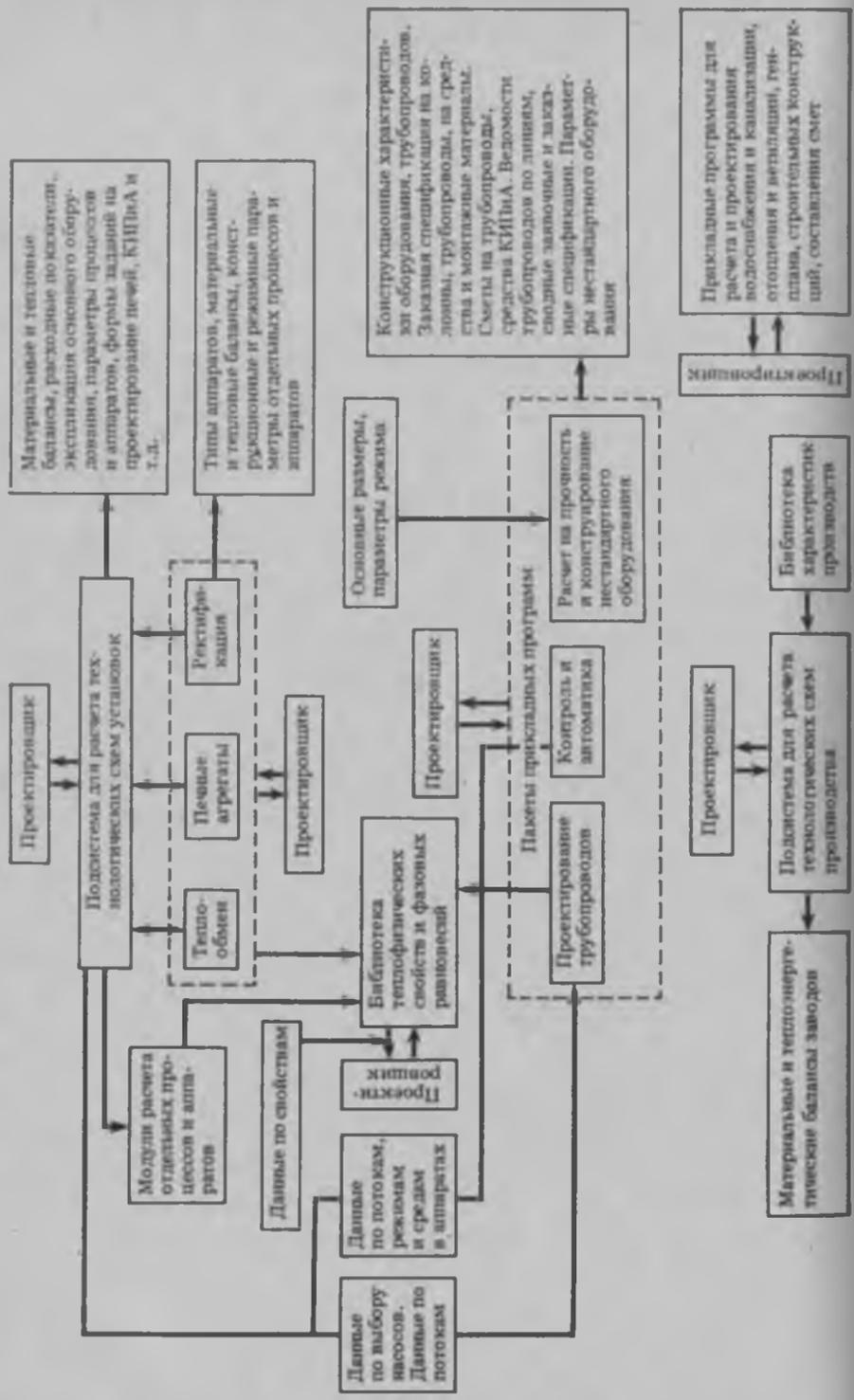
Подсистема «Технология». Осуществляет расчеты технологических схем установок различной степени детализации (расчет материальных и тепловых потоков, выбор стандартной технологической аппаратуры, разработка структур ряда однородных технологических схем, расчеты отдельных процессов и аппаратов, выпуск различных проектных документов).

Подсистема «Проектирование схем НПЗ». Предназначена для проектирования технологических схем нефтеперерабатывающих заводов с получением структуры переработки нефти, сводного материального и топливно-энергетического балансов, чертежей технологической схемы НПЗ.

Подсистема «Проектирование трубопроводных систем». Осуществляет расчет и проектирование трубопроводных систем установок, межцеховых коммуникаций и общезаводского хозяйства нефтеперерабатывающих и нефтехимических заводов на различных стадиях проектирования с выпуском проектно-сметной документации, экспликаций трубопроводов, ведомостей трубопроводов по линиям, техномонтажных ведомостей на теплоизоляцию, ведомостей объемов теплоизоляционных работ, ведомостей расхода

←

Рис. 10.1. Принципиальная функциональная схема первой очереди САПР «Нефтехим»



Конструктивные характеристики оборудования, трубопроводов. Заявка спецификации на котловую, трубопроводы, на средства и монтажные материалы. Сметы на трубопроводы, средства КИПиА. Ведомости трубопроводов по линиям, следящие записки и заказные спецификации. Параметры нестандартного оборудования

Прикладные программы для расчета и проектирования водоснабжения и канализации, отопления и вентиляции, генплана, строительных конструкций, составления смет

ловых балансов установок по заданным конструкционным и режимным параметрам процессов; приближенные расчеты материальных балансов установок; расчет материальных и тепловых балансов установок с выбором основного оборудования по заданным ограничениям на параметры выходных и промежуточных потоков с получением проектной документации; оптимальный расчет фрагментов технологических схем; оптимальный синтез систем теплообмена для сред, не изменяющих своего агрегатного состояния; проверочные, проектно-проверочные расчеты ректификации нефтяных и углеводородных смесей в простых колоннах и с несколькими вводами сырья, выносными отпарными секциями; абсорбции; реакторных процессов; печных агрегатов и т. д.; расчет, выбор и составление заказных спецификаций по трубопроводным системам, насосам, компрессорам; расчет на прочность и устойчивость колонных аппаратов, сосудов и аппаратов под давлением; составление смет на технологическое оборудование, общестроительные и сантехнические работы; расчеты технологических схем заводов; составление спецификаций и смет на оборудование и материалы КИПиА; отдельные работы по инженерным частям проекта (архитектурно-строительная, электроснабжение, отопление и вентиляция, водоснабжение и канализация, генплан).

Для решения указанных задач в системе используются следующие подсистемы.

Подсистема «Технология». Осуществляет расчеты технологических схем установок различной степени детализации (расчет материальных и тепловых потоков, выбор стандартной технологической аппаратуры, разработка структур ряда однородных технологических схем, расчеты отдельных процессов и аппаратов, выпуск различных проектных документов).

Подсистема «Проектирование схем НПЗ». Предназначена для проектирования технологических схем нефтеперерабатывающих заводов с получением структуры переработки нефти, сводного материального и топливно-энергетического балансов, чертежей технологической схемы НПЗ.

Подсистема «Проектирование трубопроводных систем». Осуществляет расчет и проектирование трубопроводных систем установок, межцеховых коммуникаций и общезаводского хозяйства нефтеперерабатывающих и нефтехимических заводов на различных стадиях проектирования с выпуском проектно-сметной документации, экспликаций трубопроводов, ведомостей трубопроводов по линиям, техномонтажных ведомостей на теплоизоляцию, ведомостей объемов теплоизоляционных работ, ведомостей расхода



Рис. 10.1. Принципиальная функциональная схема первой очереди САПР «Нефтехим»

материалов на производство теплоизоляционных работ, технических формуляров и заказных спецификаций для заказа оборудования и материалов.

Подсистема «Проектирование КИПиА». Предназначена для автоматизированного выпуска проектной документации в части КИПиА: экспликаций, спецификаций и опросных листов на оборудование КИПиА, чертежей общих видов щитов КИПиА (вид спереди и на внутреннюю плоскость щита, таблицы соединений проводов, таблицы подключения проводов).

Подсистема «Проектирование технологического оборудования». Осуществляет расчет колонной и емкостной аппаратуры; расчет на прочность и устойчивость колонных аппаратов; горизонтальных цилиндрических аппаратов, установленных на седловых опорах; расчет крепления отверстий.

Подсистема «Общестроительное проектирование». Предназначена для автоматизированного проектирования по разделам: архитектурно-строительному, электротехническому, водоснабжения и канализации, отопления и вентиляции, генплана, сметному, изыскания.

Подсистема «Комплектация». Предназначена для составления спецификаций на приборы и средства автоматизации, арматуру, отопительно-вентиляционное оборудование, насосы, технологическое, энергетическое, подъемно-транспортное оборудование, специальное и другое оборудование; для составления сводных спецификаций и ведомостей для представления в комплектующие организации; оперативного обеспечения проектировщиков информацией о выпускаемом и разрешенном к применению оборудовании.

Подсистема «Проектирование систем хладоснабжения». Предназначена для проектирования и выполнения проверочных расчетов холодильных установок: компрессорного оборудования, трубопроводов, емкостной и теплообменной аппаратуры; для выдачи информации о характеристиках системы хладоснабжения, техническом исполнении отдельных элементов, размере капитальных и приведенных затрат по отдельным элементам и всей системе.

Подсистема «Графика». Предназначена для изготовления графической и текстовой документации с использованием средств графической техники. В основе методического и программного обеспечения подсистемы лежит операционная система SOMEL.

Эффективное функционирование подсистем обеспечивается соответствующим информационным обеспечением общего назначения по теплофизическим свойствам компонентов и смесей; материальному оформлению процессов и физико-химическим свойствам материалов; проектным решениям; характеристикам действующих предприятий и процессов; характеристикам окружающей среды; патентам. Наряду с этим имеется информационное обеспечение пакетов прикладных программ, используемое только для задач пакета (ГОСТы, прејскуранты и т. д.).

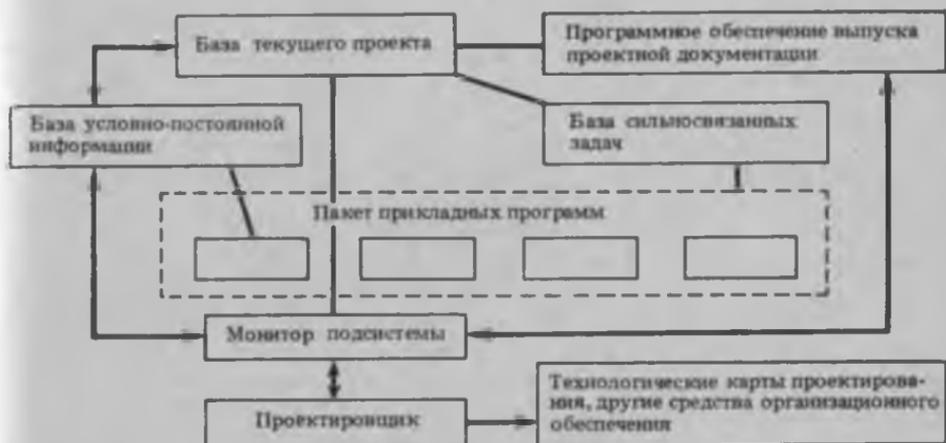


Рис. 10.2. Взаимодействие программного обеспечения в проектирующей системе

По назначению подсистемы САПР разделяются на проектирующие и обслуживающие. К проектирующим относятся подсистемы, выполняющие проектные процедуры и операции. К обслуживающим — подсистемы, предназначенные для поддержания работоспособности проектирующих подсистем. Связь между задачами, решаемыми с помощью ЭВМ и традиционным способом, осуществляется через базу текущего проекта — совокупность исходных, результирующих и некоторых промежуточных данных, получаемых в процессе проектирования конкретного объекта. Управление базой текущего проекта производится при помощи средств управления базами данных — универсальных СУБД типа ИНЭС (рис. 10.2). Связь между подсистемами может также осуществляться через базу, управляемую специализированными средствами, что позволяет экономить время. Вместе с тем подсистемы могут эксплуатироваться как автономные комплексы программ в пакетном или диалоговом режимах. Теперь рассмотрим подробнее отдельные подсистемы.

10.2. Подсистема «Технология»

Объектом проектирования подсистемы является технологическая установка — составная часть нефтеперерабатывающего и нефтехимического производства (комбината), направленного на получение одного или нескольких товарных или промежуточных продуктов. Установка состоит из аппаратов, в которых протекают различные технологические процессы, среди которых выделяются 10 типов: реакционные, разделения, теплообмена, транспортные, хранения, упаковки (затаривания), объединения (смешения), измельчения,

агломерации, формования. Каждый тип процессов имеет большое количество разновидностей по аппаратурному оформлению, применению и т. д.

В связи с этим в функции подсистемы вменяется выполнение следующих проектных работ (рис. 10.3): выбор аналогов для проектирования (на примере двух-трех производств) с оценкой проектных решений; расчет технологических схем и отдельных фрагментов с различной степенью детализации; расчет товарного баланса, приближенного материального баланса, материального и теплового балансов, балансов с выбором оборудования, режимных и конструкционных параметров; оценка (технико-экономическая) проектных решений; самостоятельные расчеты (проверочный и проектный) процессов и аппаратов; синтез схем однородной структуры (теплообмена с изменением и без изменения фазового состояния, ректификации углеводородных смесей, сложных нефтяных смесей, азеотропных смесей); выпуск проектной документации (таблиц, экспликаций, заданий другим частям проекта, технологической схемы установки); технико-экономическая оценка и сравнение с аналогом. Выполнение указанных проектных и проверочных работ осуществляется с помощью ряда ППП.

ППП по расчету процессов ректификации охватывает широкий круг задач по следующим взаимосвязанным направлениям: расчету фазовых состояний парожидкостных систем; расчету рабочих режимов ректификации для оптимального проектирования и реконструкции; синтезу оптимальных схем разделения; гидравлическому расчету колонной аппаратуры.

Программы расчета фазовых состояний охватывают такие задачи, как расчет точки росы, температуры кипения и т. д. (рис. 10.4). При этом используются самые различные модели как для идеальных, так и неидеальных смесей.

Программы расчета рабочих режимов ректификации отличаются большим разнообразием по сложности модели процесса (упрощенные и точные), постановке задачи расчета (проектная, проектно-проверочная, проверочная), виду разделяемой смеси (близкокипящие, нефтяные, смеси углеводородных газов, азеотропные, гетероазеотропные), типу ректификационных колонн или комплексов (простая колонна, колонна со стриппингами, несколькими вводами питания, гетероазеотропный комплекс), используемому алгоритму (независимое определение концентраций, метод трехдиагональной матрицы, метод от тарелки к тарелке, релаксационный метод, матричный метод). Большинство из этих методов рассмотрено в гл. 7, так же как и расчет фазового равновесия.

Пакет программ синтеза схем разделения включает программу синтеза для установок из простых колонн без рециклов при разделении смесей углеводородных газов. Развитие пакета предполагает синтез схем разделения азеотропных смесей, а также нефтяных смесей.

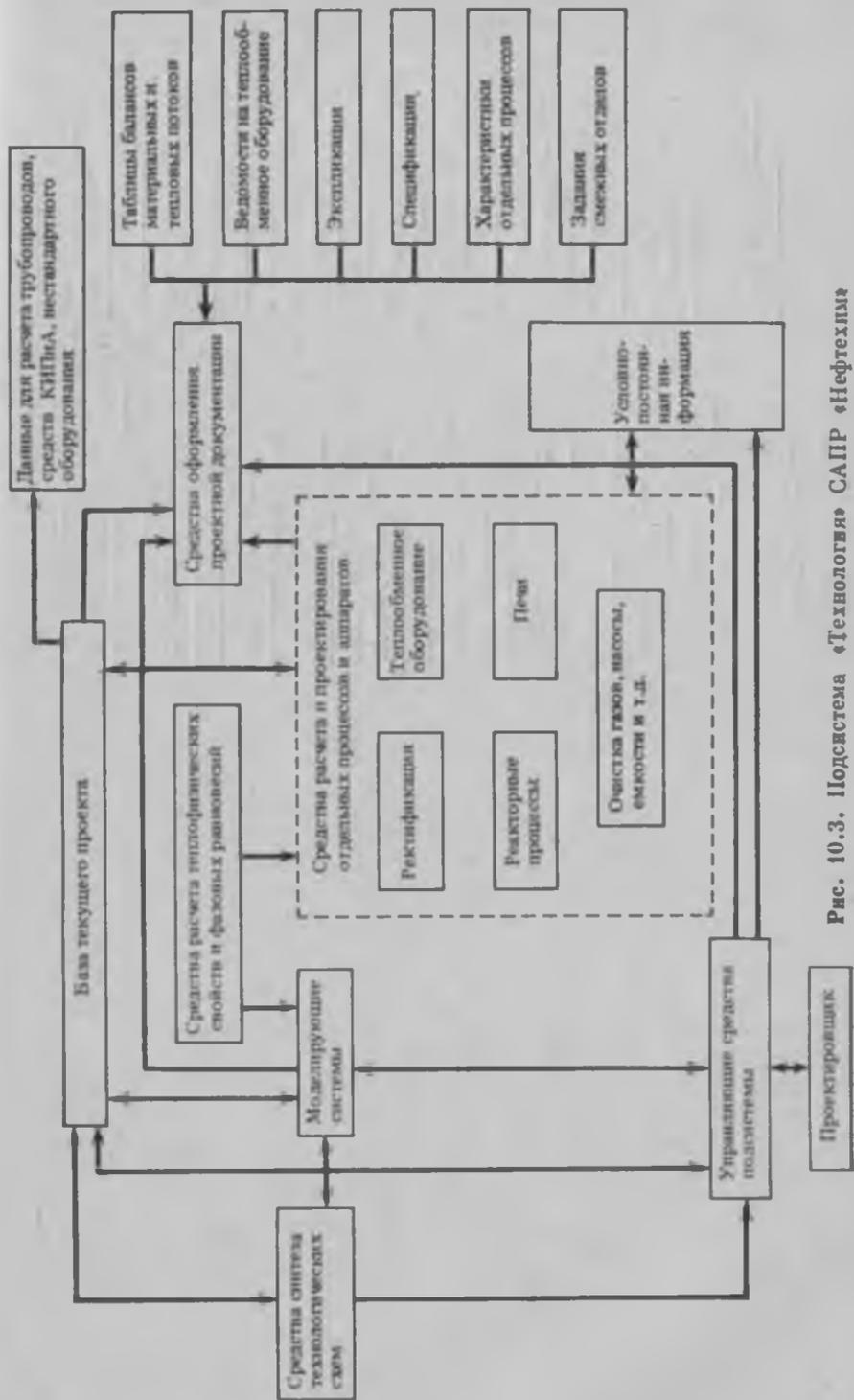


Рис. 10.3. Подсистема «Технология» САПР «Нефтехим»

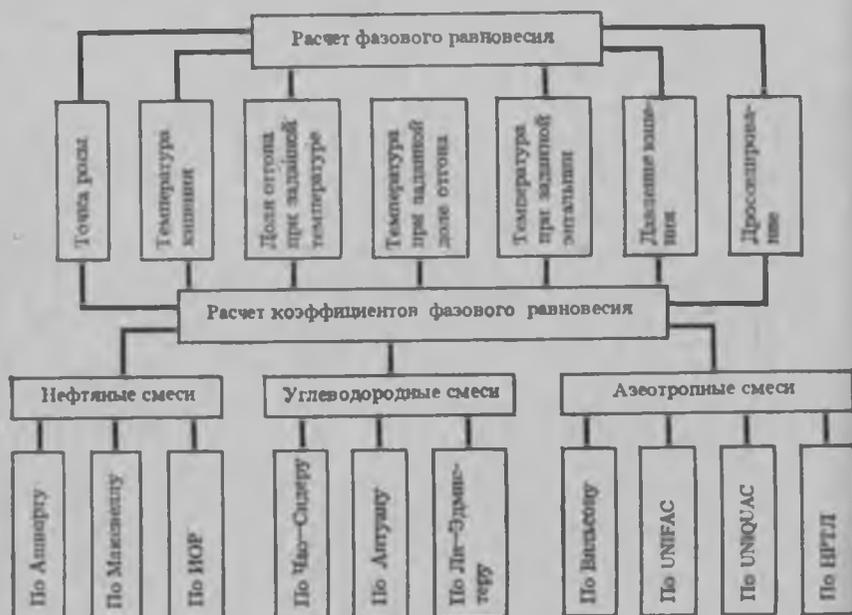


Рис. 10.4. Программы расчета фазового равновесия

Программы гидравлического расчета колонной аппаратуры реализуют алгоритмы расчета гидравлики тарелок (клапанных прямоточных, колпачковых, клапанных балластных, S-образных клапанных), насадочных колонн, выбора типа тарелок по экономическому критерию. В основе алгоритмов используются известные методики.

III проектирования теплообменной аппаратуры обеспечивает расчет и выбор стандартных теплообменников кожухотрубчатых, атмосферно-воздушного охлаждения, «труба в трубе», пластинчатых для нагрева (охлаждения) однофазных сред, конденсации и испарения одно- и многокомпонентных смесей в присутствии водяного пара и инертных газов, что составляло 85% всех расчетов стандартного оборудования по конструкции и 70% по процессам.

Пакет программ включает в себя:

- библиотеку управляющих модулей, выполняющую функции определения основных составляющих решения задачи, построения модульной и информационной структур задачи, определения вычислительной последовательности расчета;

- библиотеку вычислительных модулей для расчета и выбора теплообменной аппаратуры, содержащую программы расчета элементов теплообменников, являющихся общими для аппаратов

различных конструкций (гидравлического сопротивления, коэффициента теплопередачи, поверхности теплообмена, коэффициентов теплоотдачи, перепада давления и т. д.);

— библиотеку модулей синтеза систем теплообмена, содержащую модули расчета элементов схемы и синтеза непосредственно схемы различными методами (графоаналитическим, эвристическим и т. д.);

— информационный фонд [4—6].

Каждая из библиотек имеет собственное управляющее обеспечение, которое формирует вычислительную схему и организует ее выполнение. Формирование схемы производится в соответствии со специальными признаками. Например, определение оптимального типа теплопередающей поверхности проводится в результате анализа всего стандартного теплообменного фонда по признакам. В связи с этим все теплообменное оборудование рассматривается как конечное множество T с признаками-подмножествами: A — назначение аппарата (теплообменники и холодильники, испарители, конденсаторы); P — расположение аппарата в пространстве; N — герметичность трубного пучка; M — материальное исполнение аппарата. Требуемый тип теплопередающей поверхности выбирается в зависимости от набора признаков, характеризующих взаимодействующие потоки: агрегатного состояния, температуры, давления, корродирующих свойств и т. д. Искомая конструкция T_{opt} рассматривается как элемент множества: $T_{\text{opt}} \in T = A \cap P \cap N \cap M$.

Если область пересечения содержит несколько конструкций, то выбор оптимального типа теплопередающей поверхности ведется методом перебора по критерию, характеризующему затраты. После этого управление передается модулю, реализующему расчет и выбор соответствующих размеров аппарата.

В общем случае пакет программ для проектирования теплообменной аппаратуры ориентирован на создание теплообменной системы в результате выполнения следующих этапов; синтеза одного или нескольких вариантов увязки продуктовых потоков; проектирования каждого из теплообменников конкретного варианта теплообменной системы; получения оценок каждого теплообменного аппарата и теплообменной системы в целом по заданному критерию оптимальности (приведенным затратам, термоэкономической эффективности); оптимизации теплообменной системы; проверочного расчета теплообменной системы методом моделирования; принятия окончательных решений и получения проектно-сметной документации.

Задача синтеза теплообменной системы формулируется как задача оптимальной организации взаимодействия горячих и холодных потоков с минимумом подвода внешней энергии. Система теплообмена рассматривается состоящей из двух подсистем — внутренней (собственно теплообменники) и внешней (нагреватели, холодильники, печи, вспомогательное оборудование).

Первоначально при фиксированном количестве передаваемого тепла проводится синтез внутренней подсистемы. При этом используется графоаналитический метод с применением эвристик (см. гл. 8). Определив схему увязки продуктовых потоков при фиксированном количестве тепла, из материально-теплого баланса находят все основные и промежуточные входные и выходные температуры потоков и тепловые нагрузки на аппараты. В качестве целевой функции при оптимизации в целом принят минимум приведенных затрат:

$$\begin{aligned} \text{Пр} = & \sum (\bar{Z}_{\text{то}}/T_{\text{н}} + \bar{Z}_{\text{то}}Q_{\text{то}}) + \sum (\bar{Z}_{\text{нагр}}/T_{\text{н}} + \bar{Z}_{\text{нагр}}Q_{\text{нагр}} + G_{\text{г}}\bar{C}_{\text{г}}\tau) + \\ & + \sum (\bar{Z}_{\text{х}}/T_{\text{н}} + \bar{Z}_{\text{х}}Q_{\text{х}} + G_{\text{х}}\bar{C}_{\text{х}}\tau) + \sum (\bar{Z}_{\text{тр}}/T_{\text{н}} + \bar{Z}_{\text{тр}}Q_{\text{тр}}) + \\ & + \sum (\bar{Z}_{\text{нас}}/T_{\text{нас}} + \bar{Z}_{\text{нас}}Q_{\text{нас}} + N\bar{C}_{\text{з}}\tau), \end{aligned}$$

где \bar{Z} — капитальные затраты; G — величина потока; $\bar{C}_{\text{г}}$, $\bar{C}_{\text{х}}$, $\bar{C}_{\text{з}}$ — цена единицы горячего и холодного потока и одного киловатт-часа энергии соответственно; N — мощность двигателя насоса; τ — время работы оборудования; $T_{\text{н}}$ — нормативный срок окупаемости; Q — количество тепла; индексы «то», «нагр», «тр» и «нас» обозначают теплообменник, печь, трубопровод, насос соответственно.

Оптимизация ведется по величине количества тепла, передаваемого внутренней подсистемой теплообменников. При каждом варианте схемы (соответственно величине Q) определяются тип теплопередающей поверхности, типоразмер и число секций каждого теплообменника; проводится тепловой, гидравлический и стоимостной расчет аппаратов; рассчитываются и выбираются трубопроводы и определяется гидравлическое сопротивление всего теплообменного тракта.

III проектирования печных агрегатов предназначен для выполнения комплекса проектных и проверочных расчетов для высокотемпературного нагрева и термической переработки углеводородного сырья и нефтепродуктов (рис. 10.5). Основной частью печного агрегата является трубчатая печь — аппарат, сложный как с конструктивной, так и расчетной точки зрения. Различные условия ведения процесса определяют многовариантность конструкций печей и соответственно алгоритмов их расчета.

Проектный расчет нагревательной печи заключается в том, что на основе средней теплонапряженности поверхности змеевика, допустимых скоростей и гидравлического сопротивления продуктового потока определяются число потоков, диаметры змеевиков в конвективной и радиационного теплообмена секциях, тепловая мощность печи, расход топлива.

Проверочный расчет состоит в определении действительной теплонапряженности труб змеевика в зоне радиационного теплообмена и поверхности нагрева в конвективной секции при задан-

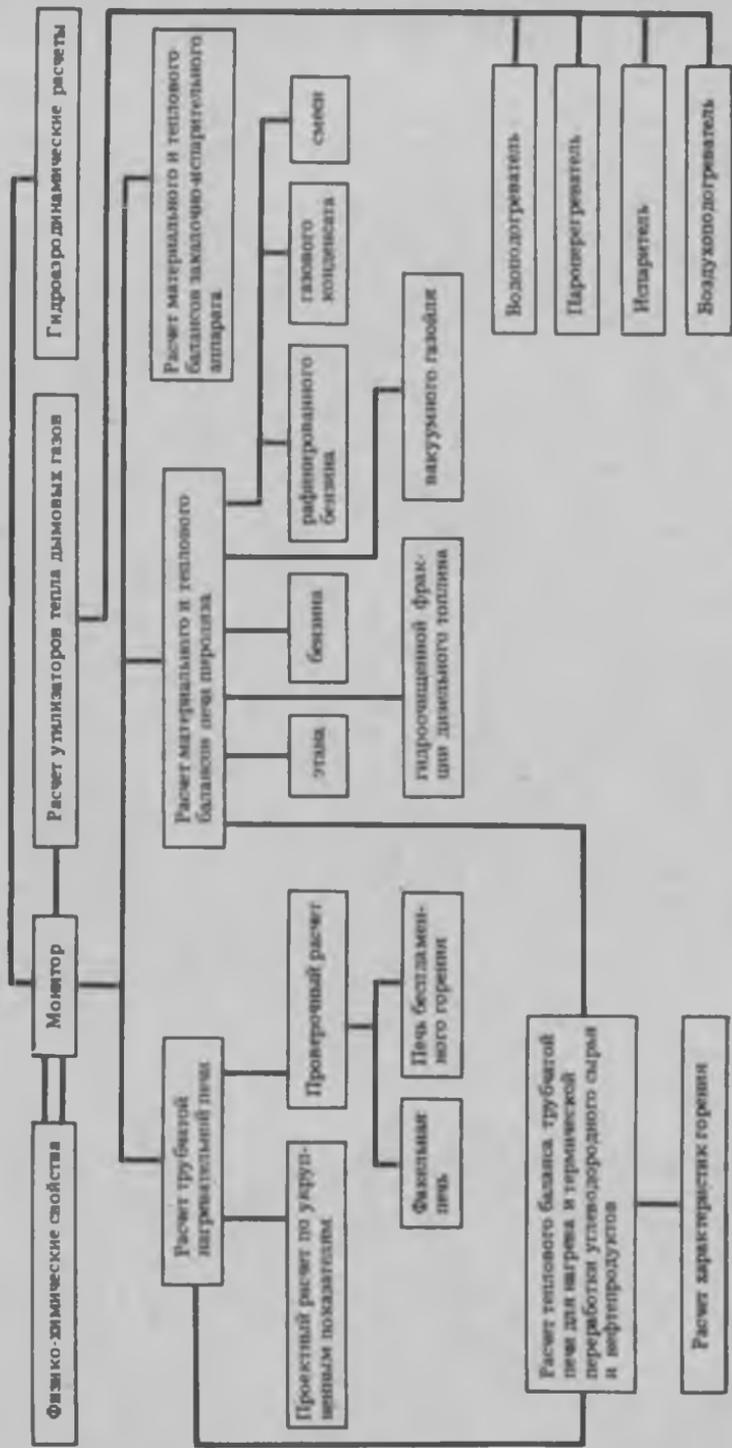


Рис. 10.5. Состав ППП «Печи»

ных расходе топлива, числе потоков, диаметрах, шаге и длине труб, тепловой нагрузке на утилизирующие устройства.

В подсистеме «Технология» этот пакет программ используется как самостоятельно, так и во взаимодействии с другими частями при решении задач расчета технологических схем установок.

ППП для расчета реакторных процессов позволяет вести расчет реакторов гидрирования ацетилена во фракцию этан—этилен, пропадиена во фракцию пропан—пропилен; реакторов гидрирования поликонденсата; реакторов метанирования окиси углерода в водороде; материального и теплового балансов процессов каталитического крекинга, пиролиза бензинов, этана, газового конденсата, рафинированного бензина, вакуумного газойля, смесей различных видов сырья.

Как уже отмечалось, отдельные пакеты могут работать автономно или же в рамках подсистемы расчета технологических схем установок. Эта подсистема использует две моделирующие системы с различными входными языками: «Спмопта» с проблемно-ориентированным языком (свободный формат) и «Нефтехим» с бланковым языком (жесткий формат).

Моделирующая система «Симопта» имеет узкую ориентацию на расчет технологических схем. Синтаксис ее языка также ограничен узкой профессиональной лексикой. При моделировании технологической схемы пользователь задает все входящие в схему аппараты, присваивая каждому из них название (индекс), а также указывая, какая модель (колонна, реактор и т.д.) ставится в соответствие этому аппарату. Всем технологическим потокам аппаратов, описываемым каждой моделью, также присваиваются имена. Потоки, в свою очередь, характеризуются параметрами, для которых выделены также имена (например, расход — P , состав — C , энтальпия — H), а состав — двумя векторами: названием компонентов и их расходами (или долями). Такое описание входной информации позволяет на стадии интерпретации проводить ее синтаксический анализ с целью устранения ошибок ввода.

Моделирующая система «Нефтехим» может быть использована для решения различных комплексных задач блочной структуры. В обеих системах реализован режим интерпретации, диагностической печати. Кроме того, в системе «Нефтехим» автоматизирована сборка структуры задачи из ее фрагментов, а структура информационного обеспечения позволяет поэтапно переходить от одного типа расчета к другому с использованием результатов, полученных на предыдущем этапе. Исходными данными для расчета являются данные о структуре схемы, модулях для обработки блоков, данные по входным потокам, начальные приближения на разрываемые потоки.

При проектировании подсистема расчета технологических схем может быть использована в самых различных режимах: поэтапного расчета схем с различной детализацией; расчета фрагментов

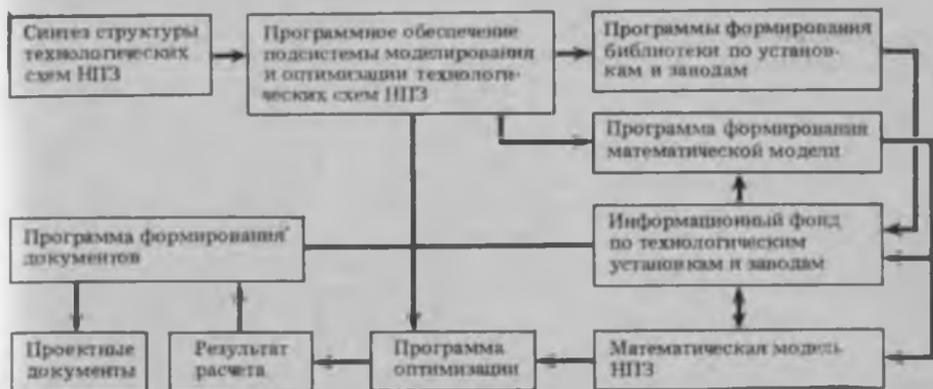


Рис. 10.6. Состав подсистемы моделирования и оптимизации схем НПЗ

схем; последовательного расчета материальных балансов, тепловых балансов с выбором оборудования и технико-экономической оценкой; расчета предварительных балансов с последующей детальной проработкой отдельных аппаратов и т. д.

10.3. Подсистема проектирования технологических схем НПЗ

Современный НПЗ состоит из большого числа различных технологических установок (первичной переработки нефти, производства этилена, газофракционирования и т. д.), установок смешения для получения топливных и топливно-нефтехимических продуктов. Комплексное проектирование и тем более синтез НПЗ как единого целого практически не представляется возможным и выполняется обычно по отдельным установкам. Основу этих расчетов составляют модули и пакеты программ подсистемы «Технология», используемые в рамках подсистемы моделирования и оптимизации технологических схем НПЗ (рис. 10.6).

Подсистема состоит из информационного фонда с данными по технологическим схемам НПЗ и технологическим установкам, необходимыми для расчета материальных и топливно-энергетических балансов НПЗ; комплекса программ, автоматически осуществляющих поиск требуемой информации в фонде; программ, формирующих проектную документацию [7, 8].

Подсистема позволяет осуществлять автоматизированный выбор технологической схемы завода, расчет оптимальных материальных балансов завода, расчет технико-экономических показателей по всему заводу, составление топливно-энергетического баланса, разработку оптимальных схем компаундирования, подготовку данных для других подсистем САПР, составление проектной документации с выдачей требуемого проектом графического материала (технологических схем НПЗ, таблиц).

Библиотека технологических схем НПЗ содержит модели расчета материальных балансов ряда строящихся и реконструируемых заводов с избыточным количеством технологических установок, что позволяет рассчитывать материальные балансы одновременно для нескольких вариантов технологической схемы. По существу, это является реализацией отдельных элементов интегрально-гипотетического метода синтеза технологических схем.

Аналогичный подход используется и при выборе структуры НПЗ для выпуска товарной продукции заданного ассортимента и объема. Подсистема проектирования позволяет выбрать оптимальный состав технологических установок на основании одного или нескольких критериев оптимизации. Для решения такой задачи составляется математическая модель обобщенной технологической схемы НПЗ соответствующего профиля: топливного, топливно-масляного, масляного, топливно-нефтехимического. Такие схемы должны включать в себя альтернативные установки, осуществляющие либо различные процессы, например каталитического крекинга или гидрокрекинга, либо различные режимы одного и того же процесса, например мягкий или жесткий режимы каталитического риформинга: различные варианты отбора смежных фракций на установках первичной переработки нефти и т. д.

Программа оптимизации технологических схем НПЗ позволяет найти оптимальный состав технологических установок, приводящий к экстремуму целевую функцию, являющуюся критерием оптимизации. Эта программа из избыточного набора установок исключает те, что снижают значение целевой функции при решении задачи ее максимизации. Выдача решения при этом производится в одном варианте. Однако ввиду того, что выбор оптимального состава технологических установок проектируемой НПЗ на основании какого-либо одного критерия оптимизации затруднителен, возникает необходимость в последовательном решении ряда вариантов расчета материальных балансов НПЗ с различными наборами технологических установок и критериев оптимизации. Окончательный выбор состава технологических установок осуществляется инженером-проектировщиком и экспертами.

10.4. Подсистема проектирования трубопроводных систем

Одной из важнейших задач при проектировании объектов нефтеперерабатывающей, нефтехимической и химической промышленности является проектирование трубопроводных систем, выбор компрессоров, насосов и их компоновка. Стоимость сооружения трубопроводов составляет 30—40% от стоимости монтажных работ, а в общих капитальных затратах на нефтехимический завод стоимость трубопроводов составляет 25—35%. Стоимость энергии на перекачку газов и жидкостей является основной частью эксплуатационных расходов на установках. Поэтому оптимиза-

ция выбора и компоновки компрессоров, насосов, аппаратов и трубопроводов дает для народного хозяйства значительный экономический эффект.

Особенностью задач оптимизации трубопроводных систем производств нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности является многообразие конструкционных и технологических параметров, влияющих на величину капитальных вложений и эксплуатационных затрат. В качестве основных параметров рассматриваются диаметры, толщины стенок и материал трубопроводов, толщина и материал теплоизоляции и ее покровного слоя, длина, конфигурация трубопроводов, размещение, способ крепления и компенсаторов температурного расширения, способ прокладки трубопроводов, параметры нагнетательных машин (насосов или компрессоров), регулирующей арматуры, нагревательных устройств и т. д. [9]. При этом большинство параметров являются взаимосвязанными, т. е. изменение одного параметра приводит к изменению других показателей трубопроводной системы (например, изменение диаметра трубопроводов приводит к изменению гидравлического сопротивления, тепловых потерь, механических напряжений и т. п.).

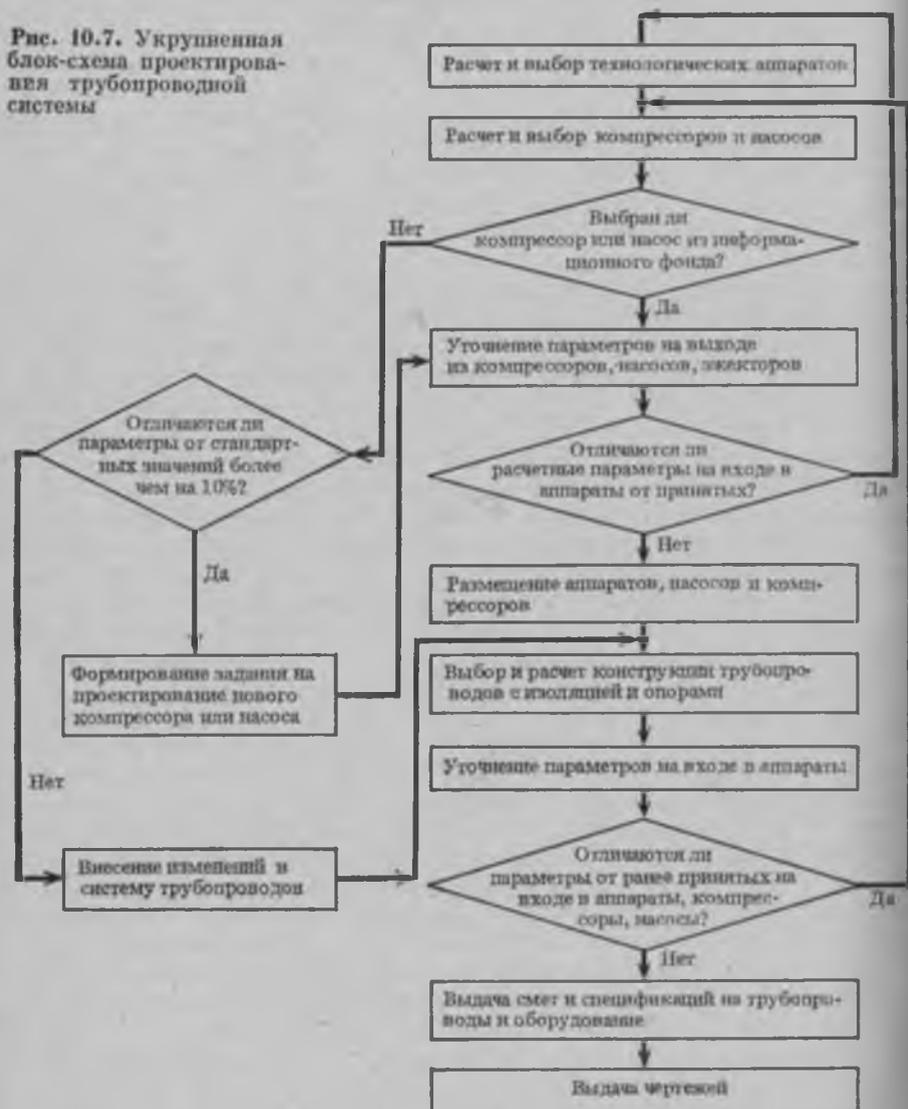
Из-за сложности постановки обобщенной задачи оптимизации при проектировании технологических трубопроводов, обусловленной разнообразием перекачиваемых продуктов, применяемыми способами прокладки, наличием технических, технологических и других ограничений, разрабатываются, как правило, локальные оптимизационные модели, предназначенные для решения отдельных типов задач.

Подсистема проектирования трубопроводных систем содержит более 30 программ, позволяющих производить следующие работы: расчет технологических параметров трубопроводных систем (давления, температуры, расхода); выбор основных параметров системы (диаметра трубопроводов, толщины теплоизоляции, давления нагнетания, перепада давления на регулирующем клапане); выбор материального оформления трубопроводных систем и составление технической документации; прочностные расчеты; расчет нестационарных процессов в трубопроводных системах.

Программы для расчета технологических параметров трубопроводных систем моделируют рабочий процесс при заданных конструкционных параметрах. Гидравлический расчет проводится для разветвленных и неразветвленных трубопроводных систем с учетом местных сопротивлений и изменения теплофизических свойств перекачиваемых продуктов. Результатом расчета является изменение по участкам давления, плотности и скорости продукта, кавитационный запас (для жидкости).

Проектирование производится в несколько этапов. На первом этапе «Разработка предварительных схем технологических трубопроводов и тепловых сетей» для каждого теплоносителя вычерчи-

Рис. 10.7. Укрупненная блок-схема проектирования трубопроводной системы



вается и прорабатывается расчетная схема, проводится расчет диаметров и согласование с технологическими отделами параметров теплоносителя. Затем составляется ведомость расходов тепла и разрабатываются чертежи общей схемы тепловых сетей. Затем прорабатывается предварительная технологическая схема трубопроводов. При этом составляется экспликация трубопроводов, определяются расходы в коллекторах общезаводских сетей и

проводится предварительный (по скоростям потоков) выбор диаметров трубопроводов для всех линий. Обе схемы передаются монтажной группе для предварительной проработки трассировки и согласования ее с отделом генплана.

Второй этап «Разработка окончательных схем технологических трубопроводов и тепловых сетей» начинается с проработки вопросов установления арматуры. Затем производится расчет оптимальных диаметров нагнетательных трубопроводов (для систем с насосами и компрессорами), толщины изоляции, параметров насосов и компрессоров и выбор их марок с одновременным составлением спецификаций, технических формуляров и опросных листов. После завершения разработки окончательных схем технологических трубопроводов и тепловых сетей проводится согласование с технологическими отделами и выдается задание отделу КИПиА на выбор приборов.

Третий этап «Разработка монтажных чертежей» выполняется на основе данных второго этапа, информации о рельефе местности и координатной модели объектов генплана. Составляется совмещенная план-схема на подоснове генплана, выбирается тип прокладки, прорабатываются и согласовываются с отделом генплана коридоры и полосы технологических и тепловых сетей, вопросы температурной компенсации и расстановки опор. Монтажная группа разрабатывает чертежи трасс и узлов и выдает задание архитектурно-строительному отделу на несущие конструкции и электротехническому отделу — на заземление трубопроводов.

Четвертый этап «Составление технической документации» связан с получением проектной документации: ведомостей трубопроводов, потребности в материалах, объемов теплоизоляционных работ; техномонтажных ведомостей на теплоизоляцию.

На пятом этапе составляются сметы и на шестом — пояснительная записка и оформляется проект.

ППП трубопроводных систем позволяет проводить расчет конструкционных и технологических параметров систем различного назначения: обвязки насосов, компрессоров, межцеховых коммуникаций, продуктопроводов, систем аварийного сброса газов. Укрупненная блок-схема проектирования трубопроводной системы приведена на рис. 10.7.

10.5. Подсистема проектирования контроля и автоматики

ППП контроля и автоматики предназначен для расчета сужающих устройств и регулирующих клапанов, выбора средств контроля и автоматики и разработки технической документации по изготовлению, монтажу и заказу оборудования и материалов.

Основу подсистемы составляет информационная база, содержащая информацию о технических характеристиках средств контроля и автоматики. При разработке подсистемы весь парк

приборов был разбит на ряд групп с близкими техническими характеристиками. Всего в базе данных имеется более 210 типов приборов (около 400 000 модификаций). Информационная база подсистемы является открытой и позволяет независимо от программы вносить новые приборы и исключать нежелательные. Непрерывное поддержание информационного фонда в состоянии, отвечающем требованиям проектировщика, — одна из главных задач подсистемы. Организационно процедура отбора и корректировки фонда производится отделом оборудования и комплектации, который отмечает снятие с производства отдельных приборов и дает рекомендации по включению новых.

В большинстве случаев приборы для однозначного описания требуют большого числа характеристик. Эти характеристики не должны быть противоречивыми или ошибочными. Поэтому в системе предусмотрена проверка входной информации на ошибочность заполнения форм и полноту, в результате чего выявляются противоречивые данные и те технологические параметры, значения которых выходят из допустимого диапазона. В каждой из восьми групп приборов (приборов расхода, давления, температуры, уровня, анализа; исполнительных устройств; вторичных приборов; регуляторов и функциональных блоков) используются три типа проверки [10]: а) проверка на целочисленность элементов массива M , являющихся кодами технических характеристик, например материалов, агрегатного состояния среды и т. д.; б) проверка элемента массива $M(I)$ на соответствие заданной числовой границе C : $M(I) * C$, где C — допустимое значение (константа или значение другого элемента входного массива; * — вариант сравнения ($>$, \geq , $<$, $=$, \neq)); в) проверка элемента массива $M(I)$ на соответствие заданной числовой границе C при выполнении условия, налагаемого на другой элемент $M(K)$: $M(K) * A \wedge M(I) * C$. Например, при расчете исполнительных устройств наличие во входном массиве значения вязкости (элемента $M(I)$) должно проверяться только для случая, когда агрегатное состояние среды (элемент $M(K)$) — жидкость (код агрегатного состояния I): $M(K) = I \wedge M(I) \geq 0$. При невыполнении условия выдается диагностическая информация, содержащая наименование подгруппы приборов, номера позиций прибора, содержащее ошибки.

Все приборы в информационной базе разделены на отдельные подгруппы. В каждой подгруппе собраны приборы, имеющие общие характеристики их описания, и информация о них хранится в виде иерархической структуры с количеством уровней не более четырех. Чем выше уровень, тем более общие характеристики прибора хранятся в нем.

Выбор требуемого прибора из информационной базы осуществляется в два этапа: на первом по заданному (возможно, неполному) ряду требований выбираются все объекты, отвечающие им,

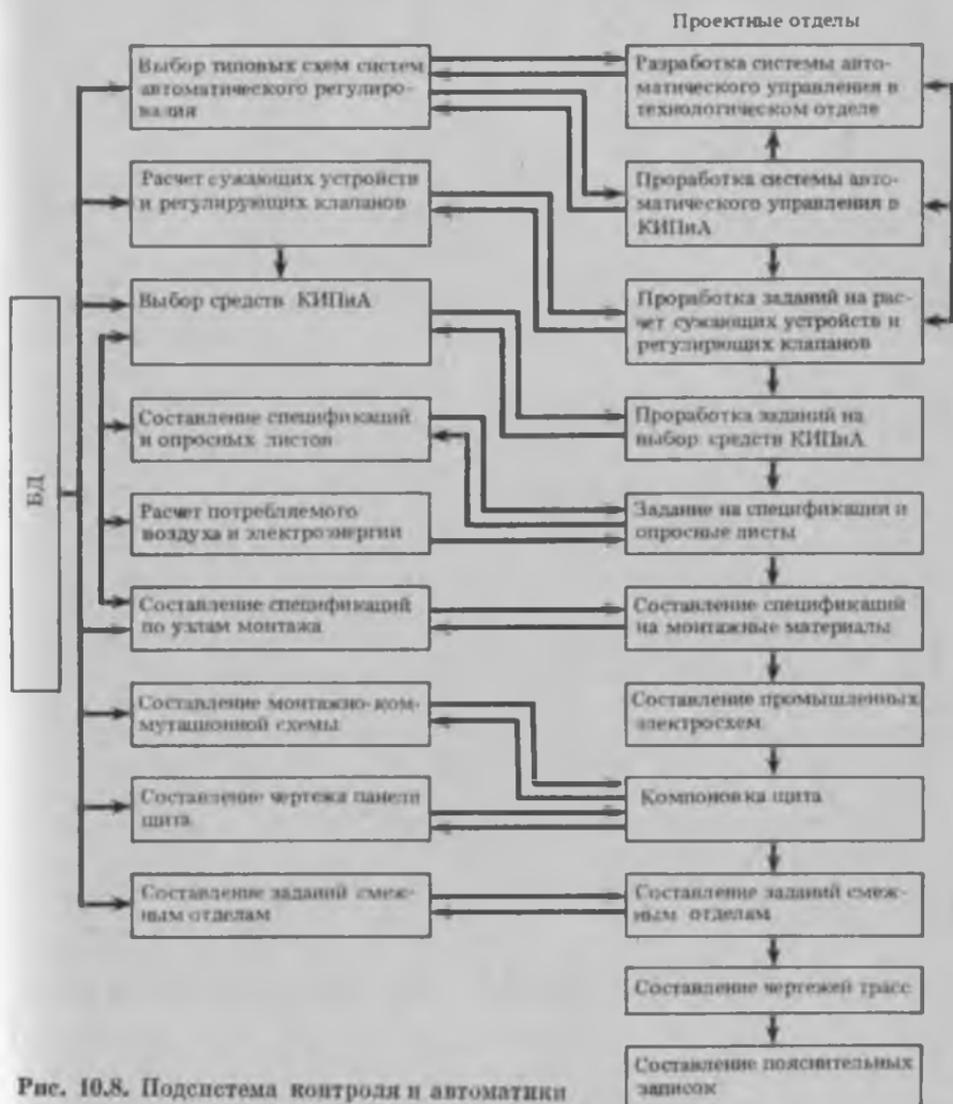


Рис. 10.8. Подсистема контроля и автоматики

а на втором — из отобранных объектов путем сравнения на основании заранее установленного ряда критериев выбирается один наилучший [11].

Входной информацией являются номер подгруппы, в которой следует искать прибор, и массив входных данных (МД). Задача заключается в том, чтобы на основании одного набора входных данных выбрать внутри заданной подгруппы единственный прибор с лучшими технико-экономическими показателями.

Пусть $Q = (P_1, \dots, P_i, \dots, P_m)$ — конечное множество приборов заданной подгруппы. Каждый прибор $P_i \in Q$ описывается массивом характеристик (МИ).

На первом этапе выделяется подмножество $Q_i \subset Q$, для каждого элемента которого Π_i выполняется условие

$$\bigwedge_{j=1}^n r_j(I) = 1,$$

где

$$r_j(I) = \text{МД}(I) * \text{МП}(I) = \begin{cases} 1 & \text{при выполнении условия;} \\ 0 & \text{при невыполнении условия;} \end{cases}$$

n — количество сравниваемых характеристик.

Выделение одного прибора с наилучшими характеристиками производится на втором этапе. Для решения этой задачи на основании опыта проектирования для каждой подгруппы составляется перечень оптимизируемых характеристик и формализуются общие для всех подгрупп операции сравнения этих характеристик — операции оптимизации.

Задача определения оптимальных схем автоматического регулирования и контроля технологических процессов является одной из наиболее важных и обычно решается технологами совместно со специалистами КИПиА. Разработка схем обычно производится двумя методами: если процесс глубоко изучен, является типовым и имеется целый ряд хорошо зарекомендовавших себя на практике систем управления, то задача определения необходимой системы решается подбором из существующих наилучшей; если процесс мало изучен (новый) или известный, но с новыми требованиями по управлению и регулированию, то выбор системы в общем случае требует предварительного опробирования схем на объекте или на математической модели.

Состав и функционирование подсистемы контроля и автоматики приведены на рис. 10.8.

10.6. Подсистема проектирования технологического оборудования

При проектировании предприятий и установок нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности большой объем занимают работы по механической части, связанные с выбором и проектированием оборудования и аппаратуры. При этом часть сосудов и аппаратов принимается по стандартам и другим нормативно-техническим материалам смежных министерств и ведомств (Минхимнефтемаша, Госстроя и т. п.), что значительно ускоряет проектирование, однако большая часть аппаратуры является нестандартной и подлежит разработке. Это объясняется, во-первых, тем, что колонная аппаратура нормируется только по диаметрам, в то время как высота определяется технологическим расчетом, а это вызывает необходимость расчета на прочность в каждом конкретном случае; во-вторых, тем, что развитие промышленности характеризуется увеличением мощностей установок, оборудование

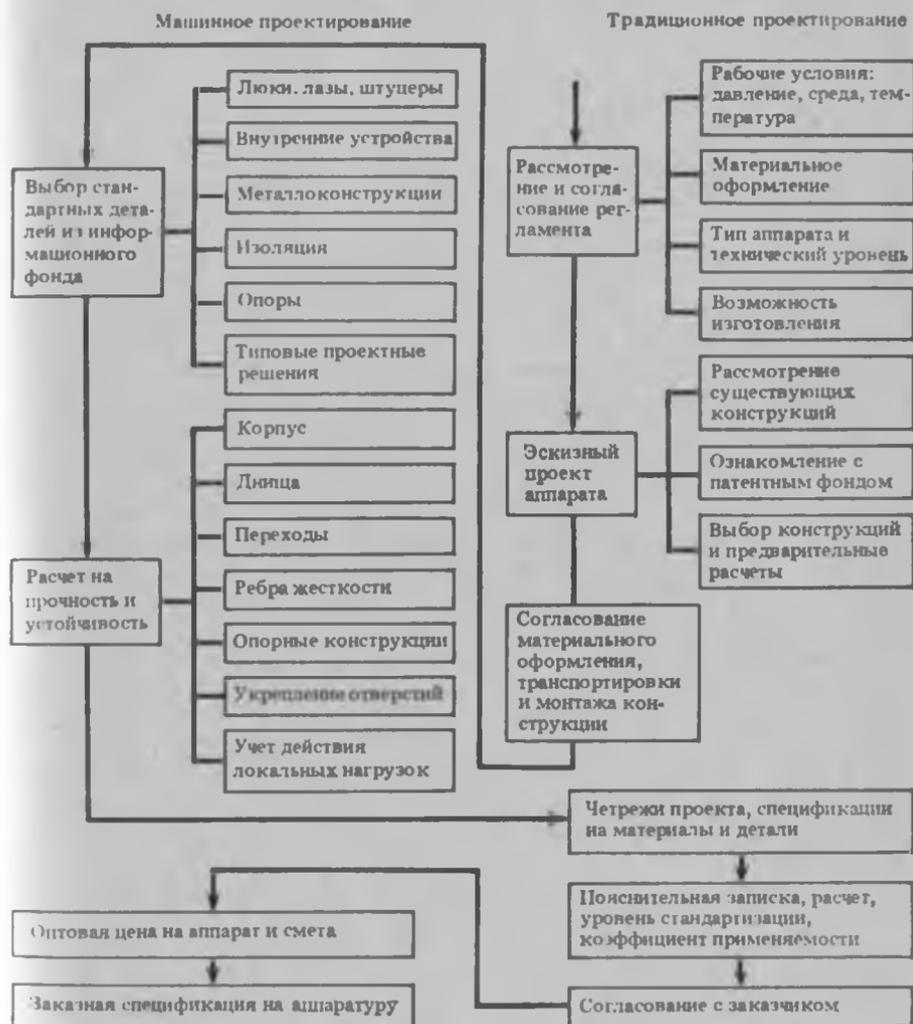


Рис. 10.9. Технологическая линия проектирования механической части

для которых разрабатывается, главным образом, проектировщиками; в-третьих, тем, что после обвязки установок остается необходимость расчета на прочность и устойчивость стандартных аппаратов.

При проектировании технологического оборудования важная роль принадлежит расчетам на прочность. На прочность подлежат расчету аппараты колонного типа, теплообменники, вертикальные цилиндрические резервуары, реакторы, горизонтальные

цилиндрические емкости под давлением и другая нестандартная аппаратура. Значение имеет при этом не только принятый метод расчета, но и соответствие исходных данных нормативно-техническим требованиям в части нагрузок, материалов, габаритов, изготовления, контроля, транспортировки, монтажа и т. д.

Указанные задачи определяют состав ППП расчета на прочность и устойчивость аппаратуры. Подсистема включает в себя три программных комплекса: а) расчет на прочность и устойчивость колонных аппаратов от действия изгибающих моментов, ветровых и сейсмических воздействий, внутреннего или наружного давления; исходными данными являются геометрические, технологические и данные строительного отдела, а результатом расчета — проектные размеры конструктивных элементов и выбор стандартной опоры (при отсутствии последней — размеры нестандартной опоры); б) расчет на прочность и устойчивость горизонтальных цилиндрических аппаратов, установленных на седловых опорах, от внутреннего давления, весовых нагрузок аппарата, продукта, дополнительных устройств и наружного давления; исходными данными являются геометрия аппарата, давление, температура, характеристики применяемых материалов, а результатами расчета — проектные размеры конструктивных элементов и нагрузки; в) расчет укрепления отверстий.

Программное обеспечение подсистемы включает более 30 модулей, работающих в рамках трех комплексов с собственными управляющими программами. Организационно подсистема построена по типу технологической линии проектирования, в основу которой положен принцип поточной технологии, построенной на соблюдении последовательности выполнения проектных операций при разделении и специализации проектных работ. При этом часть операций выполняется традиционным способом в силу невозможности формализации отдельных этапов (действий) проектирования. Методическое обеспечение подсистемы состоит из соответствующих ГОСТ, ОСТ, СНиП, РТМ. На рис. 10.9 приведена технологическая линия проектирования механической части.

10.7. Подсистема общестроительного проектирования

Решение задач общестроительной части проекта обычно выходит за рамки специализированного института, поскольку по роду выполняемых работ необходимо взаимодействие специалистов различного профиля: архитекторов, теплотехников, сантехников, электриков, монтажников и т. д. Сооружаемые производства должны не только обеспечивать выпуск качественной продукции, но и отвечать современным требованиям строительства промышленных зданий, рационального использования ресурсов местности, охраны окружающей природной среды. Сложность решения этих задач заключается и в разнообразии источников разнородной информа-

ции, которая адекватно отражает предметную область проблемы и может быть собрана лишь при наличии интегрированной сети баз данных.

Подсистема общестроительного проектирования, предназначенная для автоматизации разработки генпланов, водоснабжения и канализации, строительных конструкций, отопления и вентиляции, электротехнических систем, сметной документации, построена и развивается по пути создания технологических линий проектирования на основе собственных разработок и внедрения программ, разработанных в организациях Госстроя СССР. Это, в основном, следующие линии.

1. Технологическая линия проектирования строительной части промышленных зданий в составе подсистем: проектирования систем отопления, вентиляции и кондиционирования воздуха; проектирования систем водоснабжения и канализации с целью гидравлического расчета трасс самотечных сетей канализации, кольцевых водопроводных сетей, расчета максимальных расходов и объемов поверхностных вод, выбора материалов, класса труб и способов их укладки в траншею; проектирования электротехнических систем; разработки сметной документации.

2. ППП для автоматизированного проектирования строительных конструкций массового назначения.

3. ППП для укрупненных технико-экономических расчетов.

4. ППП для компоновки и размещения производственных комплексов и зданий, транспортных коммуникаций и т. д.

Эффективное решение указанных задач возможно лишь при надлежащем уровне использования вычислительной техники в организациях-исполнителях.

10.8. Подсистема «Комплектация»

Подсистема предназначена для автоматизации процесса составления проектной и заказной документации при разработке рабочих проектов и рабочей документации, а также при комплектовании оборудованием строящихся объектов [12].

Программное обеспечение подсистемы функционально разделено на три комплекса: спецификацию оборудования, заказные спецификации, формирование и ведение нормативно-справочной информации.

Первый обеспечивает автоматизированный выпуск и корректировку спецификаций оборудования, а также получение перечня спецификаций оборудования по объекту и перечней спецификаций оборудования, выпущенных в заданный интервал времени. Второй — автоматизированное составление заказных спецификаций, указателей к ним, а также сводных перечней спецификаций оборудования, входящих в пусковой объект. Третий — загрузка в базу дан-

ных, корректировку и распечатку нормативно-справочной информации, необходимой для функционирования подсистемы.

При автоматизированном выпуске новых спецификаций оборудования, внесении изменений в выпущенные ранее спецификации, а также для записи в базу данных спецификаций оборудования, разработанных традиционным способом (для составления заказных спецификаций), заполняется ряд форм. Первая форма — задание на выпуск спецификации оборудования (титульный лист), в которое заносятся общие данные: шифры объекта, спецификации; коды разработчика, части проекта, пускового комплекса; дата выпуска; фамилии составителей и др.; вторая форма — задание на выпуск оборудования (последующие листы), в котором указаны код оборудования, дополнительные признаки и информация, количество и позиция; другие формы — заявки на оборудование.

В состав информационного обеспечения входит нормативно-справочная и другая условно-постоянная информация: по оборудованию, изделиям и материалам, применяемым в проектах в объеме, достаточном для однозначной идентификации их в выходных документах; по заказным и выпущенным спецификациям оборудования; по проектируемым предприятиям, пусковым комплексам, объектам проектирования.

Объем хранимой информации достаточно велик. Так, в текущей редакции подсистемы содержится 4000 спецификаций оборудования с общим объемом 60 тыс. позиций, 600 заказных спецификаций с общим объемом 10 тыс. позиций и большой информационной фонд по оборудованию и материалам. Для обеспечения надежности хранения и корректировки информации, устранения избыточности и противоречивости данных, реализации быстрого и достаточно простого получения требуемых данных прикладными программами и пользователем вся хранимая информация организована как единая СУБД сетевой структуры «Сетор». В базу данных входят 24 файла прямого доступа, связанные между собой для обеспечения алгоритмов обработки информации средствами СУБД. Для однозначной идентификации хранящиеся в базе позиции оборудования, изделия и материалы кодируются кодом из десяти цифр, обозначающими класс оборудования и подкласс, марку, тип, размер и т. д.

Технология автоматизированного получения документации в подсистеме «Комплектация» приведена на рис. 10.10, где цифры обозначают потоки информации и действия по их переработке: 1 — отдел оборудования и комплектации (ОиК) дает исходную информацию на создание, а в дальнейшем на корректировку классификатора оборудования и справочников информационной базы подсистемы; 2 — программным комплексом «Формирование нормативно-справочной информации» эта информация заносится в базу данных; 3 — одновременно из базы данных выдаются на печать классификатор оборудования и необходимые справочники



Рис. 10.10. Автоматизация процесса получения документации

и эти распечатки передаются в ОиК; 4 — после просмотра распечаток ОиК передает классификатор и справочники проектным отделам; 5 — проектные отделы при необходимости, используя классификатор и справочные материалы, заполняют форму для получения спецификации оборудования; 6 — программный комплекс «Спецификации оборудования» получает данные из базы и составляет спецификации оборудования; 7 — одновременно спецификация оборудования выдается на печать и передается в проектный отдел; 8 — полученная спецификация оборудования заносится в базу данных для получения в дальнейшем заказной спецификации; 9 — при необходимости получения заказной документации заполняются соответствующие формы и передаются на ЭВМ; 10 — комплекс программ «Заказные спецификации» получает для работы информацию из базы данных и составляет заказную спецификацию, ведомости о занаряженном и незанаряженном оборудовании; 11 — заказная спецификация и ведомости печатаются и передаются в ОиК.

Подсистема разработана как универсальное программное обеспечение отраслевого назначения.

10.9. Подсистема проектирования систем хладообеспечения

Подсистема предназначена для решения ряда задач системы хладообеспечения, технического и аппаратурного исполнения отдельных элементов, определения капитальных и приведенных затрат по отдельным элементам и системе в целом. К выполняемым проектным работам относятся следующие.

Расчет системы хладоснабжения (в том числе с учетом возможности естественной циркуляции хладоагента) с целью определения состава оборудования, марки и количества отдельных видов, геометрических размеров аппаратов, значений технико-экономических показателей.

Определение эффективности работы холодильного оборудования с учетом резервирования с целью определения затрат при переменном количестве резервных элементов.

Расчет водоаммиачных абсорбционных машин различной конструкции с целью определения параметров цикла, размера теплообменного оборудования и технико-экономических показателей.

Входными данными подсистемы являются нормативно-справочная информация, включая данные ГОСТов по теплообменной аппаратуре, емкостям, трубопроводам, и данные, задаваемые проектировщиком (расходы, температура, давление и т. п.).

10.10. Подсистема «Графика»

В основе программных средств машинной графики использована программная система SOMEL (Франция), которая модернизирована применительно к отечественным СНиП и ГОСТ [13, 14]. Система SOMEL использует структурно-символический метод кодирования графической информации, т. е. синтез чертежа из заданного каталога типовых графических элементов. Отличие этого метода состоит в том, что часто повторяющиеся элементы графических изображений, присущие многим чертежам, систематизируются в базе инвариантных графических процедур, хранятся постоянно, а при цифровом описании конкретного графического изображения используются только их символические обозначения.

Компонентами базового программного обеспечения подсистемы являются следующие.

Комплекс программ со своим входным языком, который позволяет разрабатывать цифровые модели типовых графических элементов и осуществляет синтаксический и логический анализ их описания, позволяет организовать библиотеку типовых графических изображений элементов чертежа.

Комплекс программ со своим входным языком, который позволяет проводить синтез цифровой модели проектно-графического документа.

Программная часть, образующая стандартное ядро системы декодирования графической информации с ориентацией на определенный тип чертежного автомата.

На каждый тип чертежа, выполнение которого предполагается автоматизировать, разрабатывается макет со схематическим изображением его частей. На каждом макете выделяются фрагменты в соответствии с естественной структурой чертежа и с сохране-

нием их инженерного смысла: структурные, текстовые и композиционные фрагменты.

Структурные фрагменты — это геометрический образ изделия, который является трехмерным геометрическим телом, совпадающим по форме с изделием. Они программируются на базе простейших графических образов (прямоугольников, окружностей, стрелок и т. д.). На базе структурных фрагментов организуются композиционные фрагменты, которые могут представлять собой как локальные, так и общие композиции. Примерами локальных композиций являются ректификационная установка в технологической схеме, разрез здания на строительном чертеже, примерами общих композиций — совмещение ректификационной установки и реакторного узла, плана и разреза здания на одном чертеже.

Любой фрагмент задается в собственной системе координат. Определение графического содержания чертежа происходит на основе общего композиционного анализа, определения мест «посадки» структурных фрагментов на листе, расстановки общих надписей и примечаний, а также штампа и фрагментов спецификаций. Подготовленные чертежи воспроизводятся на графопостроителе.

10.11. Техническое и информационное обеспечение САПР «Нефтехим»

Техническую основу САПР «Нефтехим» составляет ЭВМ ЕС-1060 (основные характеристики приведены в табл. 6.1).

На базе ЕС-1060 создан вычислительный центр коллективного пользования, объединяющий научную и проектную части института. Архитектура комплекса позволяет постепенное увеличение мощностей по обработке информации, создание вычислительных сетей с локальными средствами меньшей мощности непосредственно в подразделениях.

Организационное обеспечение ведения методических, программных и информационных средств САПР решается взаимодействием службы САПР, научно-технического отдела, производственных отделов и ЦНИОПроекта.

Служба САПР организует сбор и анализ нужд производственных отделов в средствах обеспечения САПР; осуществляет заказ на разработку новых и усовершенствование существующих средств; организует контроль за частотой использования программ, типовых ошибок, отказов программ; готовит предложения по снятию программ с промышленной эксплуатации на основании изменения нормативной базы, предложений разработчиков, освоения новых, более совершенных средств; осуществляет разработку отдельных компонентов САПР.

Научно-технический отдел осуществляет контроль за изменениями нормативной базы проектирования, своевременно ставя

в известность производственные отделы, службы САПР и ЦНИОпроект; разрабатывает отдельные нормативные документы, предложения по развитию САПР; составляет задания на корректировку информационных фондов.

Производственные отделы разрабатывают предложения на разработку новых средств; корректировку информационных фондов, программных средств; формирует замечания о работе средств обеспечения САПР, области их применения.

ЦНИОпроект проводит разработку и усовершенствование средств обеспечения САПР; разрабатывает предложения о снятии с промышленной эксплуатации программных средств, их замене.

Создание отраслевой САПР, охватывающей всю номенклатуру производств, обычно выходит за рамки одной проектной организации и является результатом объединения усилий научно-исследовательских, специализированных и смежных организаций, учебных заведений. Система должна вобрать в себя последние достижения науки и техники на данный период и постоянно развиваться по мере совершенствования технологии, вычислительной техники, материалов, методов и форм строительства. Естественно, каждую из частей проекта должна курировать компетентная организация, располагающая квалифицированными кадрами и надлежащей вычислительной техникой.

Эффективное взаимодействие различных организаций в процессе создания САПР возможно при наличии общих методологических разработок, высококвалифицированных кадров, совместимых средств вычислительной техники. Системный подход и модульный принцип построения САПР позволяют сократить до минимума дублирование разработок за счет обмена стандартными элементами программного обеспечения не только между разработчиками, но и пользователями.¹ Такая форма обмена и организации взаимообмена обеспечивается вычислительными сетями, объединяющими в единый комплекс программные и технические средства.

Важным элементом САПР является наличие диалоговых средств, позволяющих проектировщику в активном режиме исследовать различные варианты проектных решений и принимать соответствующие решения. Однако эффективная организация этого режима сдерживается техническими средствами и сервисным математическим обеспечением.

САПР «Нефтехим» в рассмотренной редакции в большей степени ориентирована на воспроизведение существующей практики проектирования с автоматизацией работ по отдельным частям проекта. Ее применение привело к более тесному и оперативному взаимодействию различных отделов, но не привело к существенным изменениям в структуре проектного института. В перспективных планах развития САПР намечены меры как по совершенствованию структуры проекта, так и по развитию вычислительной техники и математического обеспечения.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Улин В. В., Фалькевич Г. С.* Состояние и перспективы развития работ по автоматизации проектирования в нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности // Разработка САПР в проектных организациях Миннефтехимпрома СССР. М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1985. С. 3—11.
2. *Чероновицов Г. Н., Фалькевич Г. С.* Итоги разработки и основные направления развития первой очереди САПР «НЕФТЕХИМ» // Реализация первой очереди САПР «НЕФТЕХИМ» и основные направления ее развития. М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1981. С. 3—20.
3. *Петлюк Ф. Б., Аветьян В. С.* Пакет прикладных программ расчета процессов ректификации и абсорбции и перспективы его развития // Там же. С. 20—26.
4. *Поддьякова Л. Е., Гутман М. Б.* Реализация пакета прикладных программ проектирования теплообменной аппаратуры и его развитие // Там же. С. 26—32.
5. *Бочаров Ю. П., Телков Ю. К., Поддьякова Л. Е.* Организация библиотеки программ для проектного расчета теплообменной аппаратуры // Инженерные методы расчета. М.: ВНИИНефть, 1973. С. 7—19.
6. *Воронин Г. Н., Дубровский Е. В.* Эффективные теплообменники. М.: Машиностроение, 1973. 243 с.
7. *Быков К. К., Бузовикин М. М., Русс А. С.* Подсистема моделирования и оптимизации технологических схем НПЗ и основные направления ее развития // Реализация первой очереди САПР «НЕФТЕХИМ» и основные направления ее развития. М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1981. С. 33—36.
8. *Бузовикин М. М., Быков К. К.* Анализ и синтез оптимальной структуры технологических схем НПЗ // Разработка систем автоматизированного проектирования в проектных организациях Миннефтехимпрома СССР. М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1985. С. 77—86.
9. *Миркин А. З., Усикъш В. В.* Оптимизация конструктивных и технологических параметров трубопроводных систем с использованием пакета прикладных программ проектирования трубопроводов // Научно-технические и организационные проблемы промышленного внедрения первой очереди САПР «НЕФТЕХИМ». М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1983. С. 141—145.
10. *Степанян С. Г., Гепштейн С. Б., Глазунов В. В.* Диагностика ошибок в подсистеме контроля и автоматики САПР «НЕФТЕХИМ» // Разработка САПР в проектных организациях Миннефтехимпрома СССР. М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1985. С. 105—107.
11. *Степанян С. Г.* Реализация пакета прикладных программ К и А и перспективы его развития // Реализация первой очереди САПР «НЕФТЕХИМ» и основные направления ее развития. М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1981. С. 41—45.
12. *Бирюкова Г. Н., Метелица В. Ф., Точилова Н. П., Степанян С. Г.* Подсистема «Комплектация» САПР нефтеперерабатывающих и нефтехимических производств // Разработка САПР в проектных организациях Миннефтехимпрома СССР. М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1985. С. 44—48.
13. *Корабельников М. М., Соболева Т. В.* Автоматизация чертежных работ в САПР «НЕФТЕХИМ» // Научно-технические и организационные проблемы промышленного внедрения первой очереди САПР «НЕФТЕХИМ». М.: ЦНИИТЭнефтехим, 1983. С. 36—40.
14. *Маричев В. Р.* Вопросы представления изображений в ЭВМ // Проблемы эффективности разработки систем автоматизированного проектирования. М.: Прогресс, 1978. С. 99—102.

Глава 11

АВТОМАТИЗИРОВАННАЯ СИСТЕМА
АНАЛИЗА И СИНТЕЗА ХТС

Автоматизированная система анализа и синтеза ХТС (АСАС ХТС SYNSYS), разработанная на кафедре кибернетики химико-технологических процессов МХТИ им. Д. И. Менделеева, предназначена для решения широкого круга задач, связанных с цифровым моделированием, анализом, оптимизацией и синтезом оптимальных химико-технологических систем [1, 2]. Она содержит три основных уровня: уровень автоматизированного моделирования; уровень синтеза ХТС; уровень анализа ХТС (рис. 11.1).

11.1. Концепции построения уровня
автоматизированного моделирования ХТС

Использование каждого из уровней АСАС ХТС (моделирования, синтеза и анализа) представляет определенные возможности исследователю, но особую ценность они приобретают лишь будучи взаимосвязанными, обогащая и дополняя друг друга. Тем не менее основным является, несомненно, первый уровень — автоматизированное моделирование, поскольку без возможности проведения моделирования невозможно эффективно решать ни задачи анализа, ни задачи синтеза ХТС.

При разработке уровня автоматизированного моделирования исследователь сталкивается с тремя основными проблемами: выбором подхода к моделированию ХТС; обеспечением сходимости итеративных расчетов; определением оптимальной стратегии расчета ХТС.

В настоящее время существуют два основных, в определенном смысле диаметрально противоположных подхода к моделированию ХТС: глобальное (композиционное) моделирование; последовательное (декомпозиционное) моделирование.

Первый подход подразумевает формирование некоторой глобальной системы, в общем случае линейных, нелинейных или интегродифференциальных уравнений, описывающих работу ХТС в целом, с последующим совместным (одновременным, параллельным) решением.

Второй подход подразумевает существование отдельных моделирующих блоков, которые соответствуют, как правило, различным объектам химической технологии, стыкуются с помощью координирующей программы и рассчитываются последовательно один за другим, причем в случае необходимости могут проводиться и итеративные расчеты. Такой подход предполагает проведение предварительного анализа ХТС с целью выявления оптимальной последовательности расчета моделирующих блоков.

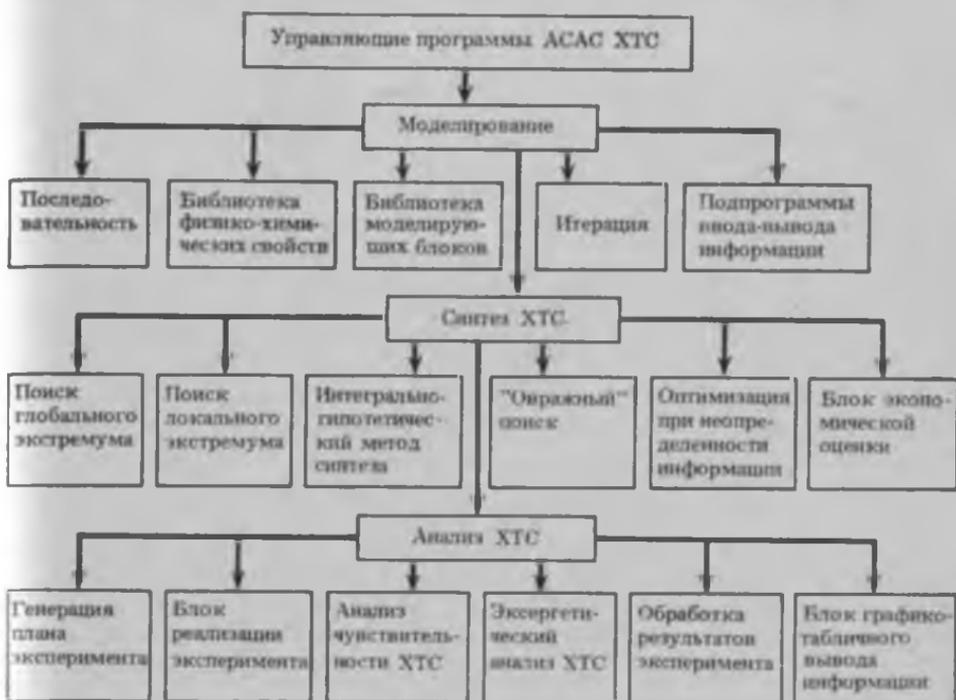


Рис. 11.1. Функциональная структура АСАС ХТС

В общем виде трудно дать исчерпывающий сравнительный анализ этих подходов, так как каждый конкретный случай моделирования имеет присущие ему особенности, хотя некоторые общие замечания могут быть сделаны. Такая сравнительная характеристика подходов приведена в табл. 11.1.

При использовании упрощенных моделирующих алгоритмов или при наличии аналитических выражений для элементов якобиана, т. е. когда время, затрачиваемое на проведение структурного анализа, становится сопоставимым или даже превышает собственно время расчета ХТС, по-видимому, становится более целесообразным использование композиционного подхода, в то время как при использовании достаточно точных детерминированных моделей с точки зрения времени расчета декомпозиционный подход к моделированию ХТС становится более предпочтительным.

Вместе с тем соответствующей организацией библиотеки моделирующих блоков и собственно общей моделирующей программы можно объединить достоинства этих двух подходов. В самом деле, функции обычного, традиционного моделирующего блока заключаются в расчете параметров выходных материальных потоков при известных параметрах входных потоков и параметров того объекта, которому соответствует данный моделирующий

Таблица 11.1

Композиционное моделирование	Декомпозиционное моделирование
Способ представления задачи	
Глобальная система линейных, нелинейных, интегрированных дифференциальных уравнений	Отдельные моделирующие блоки, стыкующиеся с помощью координирующей программы
Способ решения задачи	
Совместное (одновременное, параллельное) решение системы уравнений	Предварительный анализ ХТС для выявления оптимальной последовательности расчета. Последовательный (при необходимости итеративный) расчет
Количество вычислений	
$S = KN(N + 1)$	$S = KN \left(\frac{N}{P} + 1 \right) (1 + \alpha)$
Достоинства	
Возможность проведения расчета относительно любого набора неизвестных переменных, т. е. возможность проведения как поверочного, так и проектного расчета, а также решения задач смешанного типа	Относительная легкость осуществления и контроля итеративных расчетов. Необходимость меньшего количества вычислений. Наглядность (технологичность)
Недостатки	
Трудность создания общей моделирующей программы. Отсутствие надежных и эффективных методов решения высокоразмерных систем нелинейных уравнений. Большие требования к ОЗУ ЭВМ	Трудность или невозможность проведения проектного расчета, а также решения задач смешанного типа
Рекомендации	
Применять при использовании упрощенных моделей объектов химической технологии	Применять при использовании достаточно сложных моделей объектов химической технологии

блок. Нетрудно убедиться, что такой моделирующий блок оказывается крайне неэффективным как с точки зрения решения задачи проектирования, так и с точки зрения построения оптимального алгоритма расчета ХТС.

Однако если построить моделирующие блоки таким образом, что они будут позволять проводить расчет относительно любой входной, выходной или внутренней переменной моделируемой подсистемы, т. е. рассматривать их как «информационные преобразователи», то в смысле решения задачи проектирования система будет эквивалентна композиционному подходу и в то же время иметь возможность выбора в общем случае более эффективной последовательности расчета ХТС, чем при использовании

декомпозиционного подхода с традиционными моделирующими блоками. Таким образом, с помощью такого приема практически достигаются преимущества композиционного моделирования, одновременно улучшая традиционный метод декомпозиционного расчета ХТС.

Расчет ХТС имеет ряд особенностей, которые проистекают из специфики объектов химической технологии. Эти особенности становятся очень наглядными при рассмотрении моделирующих блоков в качестве информационных преобразователей. В общем случае математическую модель объекта химической технологии можно представить состоящей из трех основных частей: балансовой части; равновесных условий; кинетической части.

Как правило, при моделировании того или иного объекта химической технологии основные трудности встречаются при расчете кинетической части, в то время как рассмотрение балансовой части и равновесных условий является относительно простым и позволяет получить достаточно ценную информацию, которая может быть использована еще до расчета основного блока в целях проверки принципиальной осуществимости моделируемого или синтезируемого процесса, балансового расчета или пересылки тех или иных параметров. Поэтому при создании общей моделирующей программы, призванной решать как задачи моделирования, так и задачи синтеза ХТС, целесообразно оформлять результаты анализа балансовой части и равновесных условий в виде отдельных блоков, которые могут быть названы мини-моделирующими блоками (МБ) и которые должны обрабатываться еще до работы основных блоков в целях, перечисленных выше.

Предложенная концепция мультивариантных и мини-моделирующих блоков позволяет сделать вывод о целесообразности применения основных идей декомпозиционного подхода в качестве базы для построения уровня автоматизированного моделирования АСАС ХТС.

Уровень автоматизированного моделирования содержит пять подуровней: библиотеку моделирующих блоков, библиотеку физико-химических свойств, подпрограммы ввода-вывода и анализа информации, блок «Итерация», блок «Последовательность».

Библиотека физико-химических свойств предусматривает возможность расчета и хранения информации о физико-химических свойствах различных веществ. Информация хранится как в виде констант (молекулярный вес, критические параметры и т. д.), так и в виде коэффициентов аппроксимирующих зависимостей (теплоемкость, вязкость и т. п.). В рамках АСАС ХТС реализуются стандартные подпрограммы расчета физико-химических свойств индивидуальных веществ и их смесей. При моделировании ХТС необходимая информация о свойствах однократно переносится с дискового пакета в оперативную память и хранится до окончания расчетов.

Логика подпрограмм ввода - вывода и анализа информации практически исключает возможность ввода в систему ошибочных данных, что обеспечивается применением пакетного и интерактивного компилятора с проблемно-ориентированного языка системы. Функции компилятора заключаются в проведении полного синтаксического и семантического анализа входных предложений языка, выдаче исчерпывающей диагностической информации в виде ее внутреннего представления в системе. В функции упомянутых подпрограмм также входит редактирование выходной информации и расчет ряда параметров на основании поступающей информации.

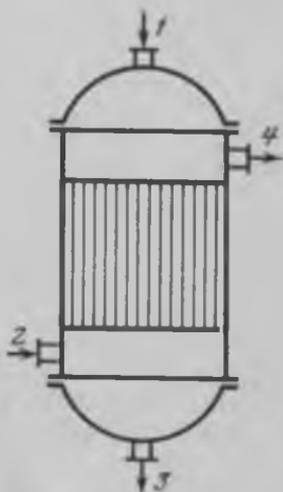
Блок «Итерация» предназначен для проведения итеративных расчетов как внутри отдельных модулей, так и при моделировании ХТС в целом. Данный блок является особенно важным, поскольку расчет подавляющего большинства ХТС связан с проведением итеративных расчетов и от успешной работы его во многом зависит эффективность функционирования всей системы.

Библиотека моделирующих блоков разработана на основе предложенной концепции мультивариантных моделирующих блоков, которые синтезируются декомпозицией всех переменных символической математической модели на внутренние, строго входные и выходные с последующим анализом возможных вариантов расчета и разработки алгоритмов каждого из вариантов. Опыт разработки и использования мультивариантных блоков в рамках системы показал, что усилия, затрачиваемые на их разработку, полностью компенсируются за счет объединения на этой основе достоинств композиционного и декомпозиционного подходов к моделированию ХТС.

Наряду с мультивариантными моделирующими блоками в библиотеке предусмотрены МБ (аппроксимационные модули), в функции которых входят пересылка части информации, не требующей расчета; осуществление простейших балансовых расчетов; проверка принципиальной осуществимости процесса при заданных параметрах и топологии ХТС. Использование МБ позволяет существенно автоматизировать процесс подготовки исходной информации, а также позволяет возложить на ЭВМ функции проверки (до и по ходу расчета) принципиальной осуществимости процесса при том или ином варианте оформления ХТС, что становится особенно актуальным при решении задачи синтеза. Ниже в качестве иллюстрации приведена процедура разработки моделирующих блоков на примере блока «Теплообменник».

При разработке данного блока была поставлена задача создания моделирующего блока, который позволял бы проводить расчет процесса теплопередачи как без изменения агрегатного состояния, так и сопровождающегося изменением агрегатного

Рис. 11.2. Схема потоков в теплообменнике



состояния (принято, что поток, в котором происходит изменение агрегатного состояния, является однокомпонентным). Особую сложность представляют те случаи, когда в рамках одного теплообменника для одного и того же теплоносителя происходят как те, так и другие процессы. Анализ возможных случаев теплопередачи показывает, что построение такого универсального МБ возможно на базе разработки трех модулей: когда оба теплоносителя не изменяют агрегатного состояния, т. е. температуры меняются у обоих теплоносителей; когда один из теплоносителей изменяет агрегатное состояние, т. е. у него температура постоянна, а у другого меняется; когда изменение агрегатного состояния происходит у обоих теплоносителей, т. е. температуры постоянны у обоих теплоносителей.

Кроме того, первый модуль подразделяется на два подмодуля: противоток и прямоток. Нетрудно видеть, что соответствующая стыковка этих модулей позволяет рассчитывать практически любой случай теплопередачи.

Остановимся более подробно на первом модуле, отметив, что два остальных модуля отличаются только результирующими формулами, в то время, как сама структура разработки алгоритмов является аналогичной.

Модуль 1 (противоток). Символическая математическая модель противоточного теплообменника, в котором не происходят изменения агрегатного состояния, может быть представлена совокупностью следующих уравнений (рис. 11.2).

А. Условия осуществимости:

$$(T_3 - T_1) * (T_4 - T_2) < 0;$$

$$(T_1 - T_4) * (T_3 - T_2) > 0; \quad (11.1)$$

$$(T_{jF_2} - T_j) * (T_k - T_{b-1}) > 0, \quad k \neq j, \quad j + 2.$$

Б. Пересылка:

$$x_1 \leftrightarrow x_3; \quad x_2 \leftrightarrow x_4; \quad (11.2)$$

$$G_1 \leftrightarrow G_3; \quad G_2 \leftrightarrow G_4.$$

В. Теплопередача:

$$Q = G_1 + C_{1,3} * (T_3 - T_1) = G_2 * C_{2,1} * (T_2 - T_4); \quad (11.3)$$

$$Q = kF * \frac{(T_3 - T_1) - (T_2 - T_4)}{\ln [(T_4 - T_1)/(T_2 - T_3)]}, \quad (11.4)$$

$$C_{1,3} = f_1(T_1, T_3, x_1); \quad C_{2,1} = f_2(T_2, T_4, x_2); \quad (11.5)$$

$$kF = kF' * \left(\frac{G_1}{G_1'}\right)^\alpha * \left(\frac{G_2}{G_2'}\right)^\beta. \quad (11.6)$$

Здесь G — расходы теплоносителей; T — температуры теплоносителей; x — вектор концентраций; C_p — удельная теплоемкость; k — модуль, равный произведению коэффициента теплопередачи на площадь теплопередачи; α , β — коэффициенты.

Основой модели являются уравнения (11.3) и (11.4), причем уравнение (11.3) можно рассматривать как балансовую часть модели, а (11.4) как кинетическую. На основании рассмотрения балансовой части модели и структуры потоков в теплообменнике можно получить ряд важных соотношений, которые и войдут в состав МБ теплообменника. К ним относятся неравенства (11.1), которые представляют собой условия, при невыполнении которых процесс теплопередачи принципиально не может быть осуществим, а также модель пересылки — соотношения (11.2). Неравенства (11.1) являются весьма полезными с точки зрения проверки информации на противоречивость, а также являются как бы контрольно-пропускным пунктом на входе в моделирующий блок. Соотношения (11.2) позволяют широко распространять получаемые данные по информационной модели ХТС.

После того как записана символическая математическая модель, для построения мультивариантного МБ необходимо выделить внутренние переменные (которые будут использоваться только внутри данного блока) и строго входные переменные (которые не будут рассчитываться внутри этого блока). Все остальные переменные могут быть как входными, так и выходными, т. е. либо должны быть заданы, либо будут рассчитываться. Анализ модели показывает, что здесь к внутренним переменным следует отнести только удельные теплоемкости теплоносителей, а строго входными будут концентрации компонентов в потоках. Следовательно, все остальные переменные являются входными и могут быть рассчитаны в тех или иных алгоритмах.

В каждом отдельном случае по этой модели могут быть рассчитаны две переменные при условии, что остальные заданы. Поскольку таких переменных семь, то общее количество возможных вариантов в данном случае равно $C_7^2 = 21$. Все эти варианты представлены в табл. 11.2, где указаны переменные, рассчитываемые по каждому из вариантов.

Таблица 11.2

Номер алгоритма	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Первая переменная	C_1	C_1	C_1	C_1	C_1	C_1	C_2	C_2	C_2	C_2	C_2
Вторая переменная	C_2	T_1	T_2	T_2	T_4	k	T_1	T_2	T_2	T_4	k

Номер алгоритма	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
Первая переменная	T_1	T_1	T_1	T_1	T_2	T_2	T_2	T_2	T_2	T_2
Вторая переменная	T_2	T_2	T_4	k	T_2	T_4	k	T_4	k	k

С помощью несложных преобразований и обобщения ряда соотношений были получены формулы, которые позволяют построить достаточно эффективные алгоритмы решения рассмотренных вариантов:

$$G_k = \frac{G_{2-k} * C_{2-k, 2-k}}{C_{k, 2+k}} * \frac{(T_{2-k} - T_{2-k})}{(T_{k+2} - T_k)}; \quad (11.7)$$

$$M = \frac{kF}{G_2 * C_{2,4}}; \quad N = \frac{G_2 * C_{2,4}}{G_1 * C_{1,3}}; \quad (11.8)$$

$$T_k = T_{k+2} + N^{(-1)^{(k-1)}} * (T_{2-k} - T_{2-k}), \quad k = 1, 2; \quad (11.9)$$

$$T_k = T_{k-2} + N^{(-1)^{(k-1)}} * (T_{2-k} - T_{2-k}), \quad k = 3, 4;$$

$$T_k = T_{2-k} + (-1)^k * A * (T_2 - T_2), \quad k = \overline{1,4}, \quad A = e^{M(N-1)}; \quad (11.10)$$

$$T_k = T_{2-k} + (-1)^k * A^{-1} * (T_4 - T_1), \quad k = 2, 3;$$

$$kF = \frac{G_1 * C_{1,3} * (T_2 - T_1)}{(T_4 - T_1) - (T_2 - T_2)} * \ln \left(\frac{T_4 - T_1}{T_2 - T_2} \right); \quad (11.11)$$

$$G_1 = \left(\frac{kF' * (T_4 + T_2 - T_1 - T_2)}{C_{1,3} * (T_2 - T_1) * \ln \left(\frac{T_4 - T_1}{T_2 - T_2} \right)} \right)^{\frac{1}{1-\alpha-\beta}} * \left(\frac{1}{G_1'} \right)^{\frac{\alpha}{1-\alpha-\beta}} * \left(\frac{C_{1,3} * (T_2 - T_1)}{G_2' * C_{2,4} * (T_2 - T_2)} \right)^{\frac{\beta}{1-\alpha-\beta}}; \quad (11.12)$$

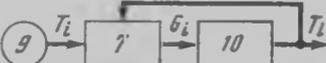
$$T_4 * (1 - N) + T_2 * (A - 1) + T_2 * (N - A) = 0;$$

$$T_4 * (1 - N * A) + T_2 * A * (N - 1) + T_1 * (A - 1) = 0; \quad (11.13)$$

$$T_4 * (1 - A) * N + T_2 * A * (N - 1) + T_1 * (A - N) = 0;$$

$$T_2 * (N * A - 1) + T_2 * N * (1 - A) + T_1 * (1 - N) = 0.$$

Таблица 11.3

Номер алгоритма	Алгоритм
1	
2-5, 7-10	
6, 11	
12-14, 16, 17, 19	
15, 18, 20, 21	

Алгоритмы приведены в табл. 11.3, где кружками обведены номера формул, используемых для задания начальных приближений при проведении итеративных расчетов. Для ускорения сходимости итеративных расчетов используется блок «Итерация». Вектор оборудования данного моделирующего блока содержит следующие параметры: перепады давлений в трубном и межтрубном пространстве; модуль kF ; базовые расходы для расчета коэффициента теплоотдачи по трубному и межтрубному пространствам; коэффициенты α и β ; признак агрегатного состояния теплоносителей; коэффициент теплопередачи; площадь теплообмена.

Итак, методология разработки таких моделей заключается в формировании символической математической модели; выделении балансовой части и оформлении ее в виде мини-математической модели; разделении всех переменных на внутренние, строго входные и входные-выходные; выявлении возможных вариантов расчета сформулированной математической модели; разработке алгоритмов расчета для каждого из вариантов.

Ускорение сходимости итерационных процессов. Основные идеи метода ускорения сходимости базируются на том, что при генерации нового приближения максимально используется информация, полученная на предыдущих итерациях, и, кроме того, все более точно описывается некоторое отображение исходной системы нелинейных уравнений. Пусть исходная система нели-

нейных уравнений имеет вид [3]

$$\Delta_i^k \equiv f_i(x_1^k, \dots, x_n^k) = 0 \quad (11.14)$$

или

$$x_i^{k+1} = \varphi_i(x_1^k, \dots, x_n^k), \quad \Delta_i^k = x_i^{k+1} - x_i^k,$$

где k — номер итерации; $i = \overline{1, n}$.

В достаточной близости от корня система (11.14) может быть аппроксимирована линейными зависимостями

$$\Delta_i = a_{i0} + \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j, \quad i = \overline{1, n}. \quad (11.15)$$

Поскольку решением (11.14) являются значения компонентов вектора x , при котором все $\Delta_i = 0$, то в качестве следующего приближения при итерационном решении можно принять решение линейной системы уравнений вида

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = -a_{i0}, \quad i = \overline{1, n}. \quad (11.16)$$

Однако такой подход будет эффективным в том случае, если система (11.14) близка к линейной при удачном начальном приближении. Одним из возможных путей улучшения сходимости этого метода является использование аппроксимирующего выражения $x_i = f(\Delta_i)$, например, в виде

$$x_i = b_{i0} + \sum_{j=1}^n b_{ij}\Delta_j, \quad i = \overline{1, n}. \quad (11.17)$$

Тогда, положив в зависимости (11.14) $\Delta_j = 0$, легко получить новые значения итерируемых переменных, которые будут равны просто b_{i0} .

При таком подходе на втором этапе нет необходимости в решении системы линейных уравнений и, кроме того, из всех коэффициентов зависимости (11.17) необходимы только коэффициенты b_{i0} .

Таким образом, по мере проведения шагов итерации появляется возможность все более повышать степень зависимости $x_i = f(\Delta_i)$, т. е. все более точно описывать некоторое отображение системы (11.14) и, следовательно, все более точно получать приближение к решению. Например, после проведения $2n + 1$ итераций в качестве $x_i = f(\Delta_i)$ можно использовать выражение

$$x_i = b_{i0} + \sum_{j=1}^n b_{ij}\Delta_j + \sum_{j=1}^n b_{ijj}\Delta_j^2, \quad i = \overline{1, n}. \quad (11.18)$$

При этом необходимо получать не все коэффициенты зависимости (11.17), а только b_{i0} , что существенно упрощает алгоритм.

Для получения исходных зависимостей (11.17) необходимо иметь $n + 1$ значение для Δ при различных значениях переменных x (исходный базис). Для этого делается первый шаг ($k = 1$) по методу простой итерации

$$x^{k+1} = x^k + \Delta^k, \quad (11.19)$$

а следующие $n - 1$ шагов осуществляются на основе расчета коэффициентов интерполирующих зависимостей из соотношения

$$B = [D^T]^{-1} X, \quad (11.20)$$

где $D [k^*(0: k - 1)]$ — матрица, элементы которой Δ_{ij} равны невязке по j -му уравнению на i -м шаге итерации, за исключением первого столбца Δ_0 , элементы которого равны единице; $X [k^*(k - 1)]$ — матрица, элементы которой x_{ij} равны j -й итерированной переменной на i -м шаге итерации; $B [(0: k - 1) * (k - 1)]$ — матрица, элементы которой b_{ij} равны i -му коэффициенту (11.17) для j -й итерированной переменной. При этом из всех коэффициентов необходимы только коэффициенты первой строки матрицы B , которые и являются новым приближением соответствующих итерированных переменных. Отсюда следует, что из матрицы $[D^T]^{-1}$ нужна только одна первая строка, что позволяет экономизировать процедуру обращения.

Поскольку при генерации исходного базиса количество шагов итерации k не превышает n , то на каждом шаге из соотношения (11.20) могут быть определены новые приближения только для $k - 1$ итерированных переменных, а для остальных делается шаг по простой итерации. Причем для каких конкретно итерированных переменных будут вычислены новые приближения по формуле (11.20), а следовательно и будет использована полученная на предыдущих шагах итерации информация о Δ_i^k и x_i^k в виде матриц D и X , должно определяться на каждом шаге итерации в соответствии с выбранным критерием точности поиска, например:

$$\max_{i=1, n} \left| \frac{\Delta_{ki}}{x_{ki}} \right|. \quad (11.21)$$

т. е. на $(k - 5)$ -й итерации будут скорректированы по соотношению (11.20) значения тех $(k - 1)$ -х итерированных переменных, для которых значения относительных невязок уравнений максимальны.

Если в процессе генерации МБ какая-либо переменная выходит за границы, то осуществляется ее коррекция с вводом переменной в заданные границы по алгоритму:

$$\begin{aligned} \text{«Если } x_i^{k+1} > x_i^{\max}, \text{ то } x_i^{k+1} &= 0,5 (\max_{j=1, k} (x_j^i) + x_i^{\max})\text{»}; \\ \text{«Если } x_i^{k+1} < x_i^{\min}, \text{ то } x_i^{k+1} &= 0,5 (\min_{j=1, k} (x_j^i) + x_i^{\min})\text{»}. \end{aligned} \quad (11.22)$$

Для систем нелинейных уравнений (11.17), начиная с $(n + 1)$ -й итерации, расчет очередного приближения может осуществляться либо с помощью (11.20), либо с помощью соотношения

$$B = [D^T D]^{-1} D^T X, \quad (11.23)$$

где $[D^T D]^{-1}$ — матрица ковариаций.

В первом случае, начиная уже с $(n + 2)$ -го шага в (11.17), могут быть введены квадратичные члены Δ_i^2 , соответствующие на данном шаге итерации максимальным соотношениям $|\Delta_i/x_i|$, затем с $2(n + 1)$ -го шага — билинейные эффекты $\Delta_i \Delta_j$, после $[n(n - 1)/2]$ -х шагов — кубические члены Δ_i^3 , затем эффекты тройного взаимодействия и так далее, т. е. постепенно будет осуществляться все более точное описание некоторого отображения (11.14). Соотношением для получения новых значений итерируемых переменных все время остается формула (11.20), в которой происходят соответствующие модификации матриц D и X . Причем при введении в них информации о новой точке у матрицы D появляется новая строка, соответствующая вектору невязок уравнений (11.14) на данном шаге итерации, и новый столбец, соответствующий введению нового члена в (11.17), а у матрицы X заполняется только новая строка, в которой будут храниться координаты новой точки. Если в процессе итерации значения итерируемых переменных выходят за указанные границы, то их коррекция осуществляется по алгоритму (11.22). Если в процессе такой коррекции та или иная переменная «прижимается» к своей границе, то это, как правило, свидетельствует о некорректном задании этой границы.

В соответствии с другой стратегией расширение (11.17) наступает только по достижении необходимого количества шагов: для введения Δ_i^2 с помощью (11.23) осуществляется n шагов, для введения билинейных эффектов — $n(n - 1)/2$ шага и т. д. В этом случае использовать для расчета коэффициентов (11.17) формулу (11.20) можно только в момент расширения (11.17), что представляет собой алгоритмическое добавление в матрицу D соответственно квадратичных членов, эффектов парного взаимодействия и т. д. (новые столбцы), в то время как введение информации о новой точке в матрицы D и X (новые строки) происходит на каждом шаге.

Практические исследования показали, что качественное улучшение описания отображения (11.14) достигается преимущественно при введении в (11.17) новых членов на каждом шаге итерации, что свидетельствует о предпочтительности использования для расширения базиса первой стратегии. Предлагаемый алгоритм выбора вводимых в (11.17) новых членов позволяет минимизировать максимальные относительные невязки уравнений на каждом шаге итерации, что непосредственно влияет на скорость сходимости метода.

Определение оптимальной последовательности расчета ХТС. В основу выбора положен принцип динамического программирования, и задача расчета представляется как задача заполнения матрицы потоков SN и матрицы оборудования EN , т. е. считается, что ХТС рассчитана, если определены все элементы этих матриц. При этом полагается, что в начальном состоянии матрицы SN и EN либо не заполнены, либо частично заполнены исходной информацией, а в конечном состоянии они полностью заполнены. По существу, матрицы построены по аналогии с базами данных (см. гл. 5). Так, матрица потоков SN содержит всю информацию о потоках ХТС. Каждая строка этой матрицы соответствует одному потоку и содержит информацию о расходе, температуре, давлении и концентрациях компонентов в этом потоке. Матрица оборудования EN содержит всю информацию об аппаратах ХТС. Каждая строка этой матрицы соответствует одному аппарату и содержит информацию о параметрах этого аппарата. Матрица процесса MD полностью характеризует топологию ХТС. Каждая строка этой матрицы соответствует одному аппарату и содержит его порядковый номер, условное название и номера потоков, с ним связанных. Таким образом, матрицы полностью характеризуют химико-технологическую схему.

Алгоритм заключается в том, что ХТС, состоящая из N аппаратов, представляется в виде последовательности N этапов, причем каждому из них ставится в соответствие N вершин (по числу аппаратов). Добавляя фиктивные вершины начального и конечного состояний и соединив их через промежуточные вершины (аппараты), можно получить сеть, содержащую все возможные варианты расчета ХТС. Переход из начального состояния в конечное по какому-либо маршруту будет соответствовать определенной последовательности расчета ХТС.

Анализ схемы начинается с последнего N -го этапа. При последовательном анализе каждой из вершин этого этапа дугам, выходящим из этих вершин, присваивается некоторая величина, эквивалентная времени расчета этой вершины, а также освобождаются в матрицах SN и EN те элементы, которые рассчитываются в этих вершинах, после чего осуществляется переход к вершинам $(N - 1)$ -го этапа. В дальнейшем параметры, которые рассчитываются в данной вершине, относятся к выходным, а те, что должны быть известны для расчета этой вершины, — к входным.

При анализе любой вершины $(N - 1)$ -го этапа рассматриваются все возможные переходы из этой вершины на вершины последующего этапа. Запрещенным в данном случае будет переход на вершину того же самого горизонтального слоя вершины. При рассмотрении пары вершин $-(N - 1)$ и N -го этапов возможны следующие ситуации.

А. У вершин перекрываются множества выходных параметров. С точки зрения расчета ХТС это означает, что в той и другой

вершине рассчитываются одни и те же параметры. Поскольку дважды рассчитывать одни и те же параметры бессмысленно, то этот переход должен быть исключен из дальнейшего рассмотрения.

Б. Множество входных параметров предыдущей вершины перекрывается со множеством выходных параметров последующей вершины. С точки зрения расчета ХТС это означает, что для расчета предыдущей вершины необходимы параметры, которые становятся известными лишь на последующей стадии, что приводит к необходимости организации итеративного расчета между этими вершинами по переменным, по которым наблюдается перекрытие.

В. Перекрываются множества входных параметров вершин. Это означает, что для расчета этих вершин должны быть известны одни и те же параметры.

Г. Множество выходных параметров предыдущей вершины перекрывает множество входных параметров последующей. Это означает, что расчет предыдущей стадии делает возможным безытеративный расчет последующей.

Эти случаи отличаются различными способами формирования суммарной величины критерия оптимизации. В двух последних случаях суммарная величина критерия будет равна сумме времен расчета двух рассмотренных вершин. Во втором случае суммарная величина критерия будет равна сумме времен расчета двух рассмотренных вершин, умноженной на некоторый множитель K^m , где m — число итерируемых переменных, K — параметр, отражающий скорость сходимости итеративного расчета.

Если пользователь располагает какими-либо сведениями относительно сходимости итерации по тому или иному параметру, то он может задать для каждого цикла свой параметр K . В противном случае, при использовании блока «Итерация», автоматически задается $K=5$.

После того как подобным образом проанализированы все возможные переходы из рассматриваемой вершины, в соответствии с принципом динамического программирования из этих переходов выбирается переход с минимальной суммарной величиной критерия оптимизации, а в матрицах SN и EN освобождаются дополнительно элементы, соответствующие расчету этой вершины. В тех случаях, когда оптимальный переход будет итеративным, переменные, по которым будут проводиться итерации, заносятся в список итерируемых переменных. Аналогичный анализ проводится для всех вершин этого этапа, после чего имеется для каждой вершины однозначный переход, на вершину последующего этапа. Затем аналогично анализируются вершины $(N-2)$ -го этапа и т. д. до первого этапа включительно.

После анализа вершин первого этапа уже имеется несколько возможных вариантов расчета ХТС, причем для каждого варианта будет определена оценка времени расчета и, что немаловажно, освобожденные элементы матриц SN и EN будут указывать

на те переменные, которые должны быть заданы для проведения расчета по данному маршруту, чтобы сделать задачу расчета ХТС определенной. Кроме того, для каждого варианта маршрута будет готов и список итерируемых переменных. Оптимальный маршрут может автоматически выбираться из соображений минимальной оценки времени расчета или может выбираться пользователем исходя из каких-либо других соображений, после чего номера вершин этого маршрута последовательно заносятся в вектор, определяющий порядок расчета ХТС.

Если вершине соответствует несколько алгоритмов расчета, то она представляется в виде совокупности вершин, отражающих эти алгоритмы. В этом случае анализ схемы ведется уже не на уровне аппаратов, а на уровне алгоритмов их расчета, т.е. определяется не только оптимальная последовательность расчета объектов ХТС, но и указывается, по каким алгоритмам их лучше всего рассчитывать.

11.2. Разработка уровня синтеза ХТС

На данном уровне ставилась задача определения технологической топологии ХТС, параметров аппаратов и параметров технологических потоков, соответствующих оптимальному значению критерия эффективности функционирования ХТС. Методологической основой является интегрально-гипотетический принцип синтеза, заключающийся в последовательной разработке, анализе и оптимизации некоторого множества альтернативных вариантов технологической топологии и аппаратурного оформления синтезируемой схемы.

Общую задачу синтеза можно разделить на шесть подзадач: алгоритм интегрально-гипотетического синтеза ХТС, поиск локального экстремума, поиск глобального экстремума мультимодальных функций, поиск экстремума «овражных» функций, оптимизация при неопределенности информации, расчет экономических показателей функционирования ХТС.

Интегрально-гипотетический принцип синтеза ХТС. Математическая формулировка алгоритма основана на понятии коэффициентов разделения, которые используются при расчете процессов разделения. У каждого объекта химической технологии, моделирующий блок которого входит в библиотеку, выделяются входные и выходные потоки, которые соответствуют входным и выходным материальным потокам (рис. 11.3). Каждому входному потоку ставится в соответствие смеситель, а каждому выходному — разделитель. Имеются также подсистемы входа в ХТС, которые имеют только выходные потоки, а также подсистемы выхода, которые обладают только входными потоками.

Все входные и выходные потоки нумеруются, после чего формируется матрица, строки которой соответствуют выходным

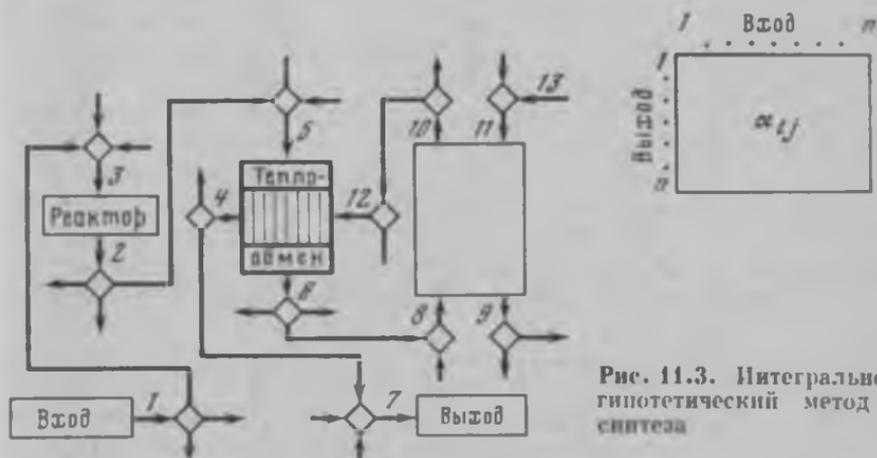


Рис. 11.3. Интегрально-гипотетический метод синтеза

потокам, а столбцы — входным. Элементы этой матрицы α_{ij} показывают долю любого i -го выходного потока в j -м входном, т.е. являются коэффициентами разделения i -го разделителя. На α_{ij} накладываются ограничения:

$$0 \leq \alpha_{ij} \leq 1, \quad i = 1, 2, \dots, M. \quad (11.24)$$

$$\sum_{j=1}^N \alpha_{ij} = 1, \quad j = 1, 2, \dots, N. \quad (11.25)$$

При таком подходе задача синтеза оптимальной ХТС сводится к задаче нелинейного программирования, т.е. к отысканию такого набора α_{ij} (отражающих топологию системы), а также параметров аппаратов (матрицы EN) и технологических потоков (матрицы SN), которые соответствовали бы оптимальному значению критерия эффективности. Задавая предварительно параметры оптимизации α_{ij} , EN и SN , можно учесть опыт и интуицию пользователя. Более того, пользователь может это сделать задавая, например, начальную конфигурацию ХТС с помощью матрицы α_{ij} , а также может корректировать процесс синтеза на любом из его этапов. Важно отметить, что использование мини-моделей при синтезе и оптимизации ХТС позволяет рассматривать их как постоянно действующие ограничения, поскольку одной из составляющих частей мини-моделей является условие осуществимости, при нарушении которого процесс является нереализуемым. Таким образом, наличие мини-моделей позволяет еще до полного расчета химико-технологической системы оценить принципиальную возможность реализации процесса при заданной топологии и параметрах ХТС, что существенно упрощает решение задачи синтеза.

Важным вопросом является выбор соответствующего алгоритма оптимизации, поскольку обычно задача синтеза характеризуется многомерностью, мультимодальностью (многоэкстремально-

стью) и наличием «оврагов». Многомерность безусловно является недостатком описанного подхода к решению задачи синтеза. Однако, при необходимости, она может быть снижена за счет использования различных эвристических правил, которые позволяют, например, зафиксировать ряд α_{ij} на определенных значениях, причем если какое-либо α_{ij} заведомо должно равняться единице, то можно исключить из рассмотрения всю строку, в которой находится это значение α_{ij} . Размерность задачи также существенно снижается за счет того, что далеко не все значения α_{ij} в каждом конкретном случае являются оптимизирующими переменными.

Поиск локального экстремума. Опыт решения высокоразмерных задач синтеза ХТС ($N > 20$) при наличии существенного количества ограничений ($M > 30$) показал, что наиболее эффективным алгоритмом является одна из модификаций алгоритма случайного поиска с обратным шагом. В качестве метода одномерного поиска используется метод Дэвиса—Свенна—Кемпп.

Модификация метода состоит в том, что введено понятие «зона перекрытия». Если «прямой» шаг оказывается неудачным, то делается «обратный» шаг. Если и он неудачный, то на «зону бросаний» накладываются ограничения в виде двух секторов, для которых направление неудачных бросков является осью симметрии, а точка, из которой производятся бросания, служит их центром. Серия бросков из данной точки считается законченной, если вся зона окажется перекрытой. Опытным путем получено, что лучшие результаты получаются для угла закрытия сектора, косинус которого лежит в интервале от 0,5 до 0,7. Случайные направления генерируются с учетом зоны перекрытия.

Поиск глобального экстремума. Наличие данного алгоритма объясняется тем, что целевая функция при решении задач синтеза имеет, как правило, мультимодальный характер, обусловленный возможностью существования нескольких конфигураций ХТС. Идея построения алгоритма основана на разработке специальной стратегии выбора исходных точек для поиска локальных экстремумов и введения понятия запретных областей. Основные отличия метода от известного [4] заключаются в следующем.

Ортогональная система векторов строится не только на базе точки экстремума, но и на базе исходной точки.

Если из какой-либо исходной точки в результате локального спуска получен уже известный экстремум, то для получения новой точки делается шаг, в два раза больший, чем предыдущий.

После каждого локального спуска в пространство поиска выделяются две запретные зоны, которые строятся на основе исходной точки и точки экстремума. Данные области представляют собой гиперсферы с центрами в исходной точке и в точке экстремума и с радиусами, равными соответственно $r_1 = 0,05R$ и $r_2 = 0,95R$, где R — расстояние от исходной точки до точки экстремума.

Каждая новая исходная точка, попадающая внутрь какой-либо из таких гиперсфер, рассматривается как точка, априорно ведущая к уже известному экстремуму, и локальный спуск из нее не осуществляется.

Поиск в любом из ортогональных направлений считается законченным, если исходная точка приводит к уже известному экстремуму (или попадает в запретную область), а затем выходит за рамки заданных ограничений. Поиск также заканчивается, если эти события происходят в обратной последовательности.

Поиск экстремума «овражных» функций. Алгоритм поиска глобального экстремума эффективен для многоэкстремальных функций, однако в тех случаях, когда целевая функция имеет «овражный» характер, он может привести к бесконечному удлинению поиска, поскольку каждый спуск на дно «оврага» будет восприниматься как появление нового экстремума. В связи с этим для алгоритма поиска глобального экстремума разработан блок, позволяющий интерполировать дно «оврага» криволинейной зависимостью с одновременной интерполяцией параболической зависимостью поведения целевой функции вдоль дна «оврага». Этот блок включается в работу в том случае, если при исследовании одной совокупности ортогональных векторов обнаружено не менее трех новых экстремумов, что является косвенным признаком наличия «оврага». Проверка данного алгоритма на различных «овражных» функциях показала, что он позволяет в среднем в 10 раз ускорить поиск экстремума. Например, экстремум функции Розенброка идентифицируется за два-три шага вдоль дна «оврага».

Экономическая оценка функционирования ХТС. В качестве критерия эффективности пользователь может по выбору использовать приведенные затраты, любую из их составляющих или любое другое сформированное им выражение. Капитальные затраты рассчитываются либо по методу функциональных единиц, либо на основании метода преysкурантных цен. Стоимость продукции и ее составляющие оцениваются на основании результатов моделирования ХТС и ряда вспомогательных коэффициентов. Результатом работы данного подуровня является расчет статей приведенных затрат, включая преysкурантную стоимость оборудования, капитальные вложения в объекты основного производственного назначения и общую сумму капитальных вложений, а также затраты по отдельным статьям себестоимости продукции и полную себестоимость [5].

Оптимизация при неопределенности информации. Традиционные методы оптимизации часто дают неудовлетворительные с практической точки зрения результаты, обусловленные тем, что не учитывается ряд объективно существующих факторов неопределенности. В качестве основных из них следует выделить неопределенность параметров оптимизации, связанную с невозможностью их

точного задания; неопределенность параметров критерия оптимальности, вызванную тем, что ряд величин, необходимых для его вычисления (например, параметры математических моделей), можно задать лишь с некоторой точностью; неопределенность параметров ограничений. Неучет указанных факторов может привести к практически не реализуемому варианту (режиму) функционирования ХТС вследствие выхода значений параметров за допустимую область.

Математически задача оптимизации с учетом неопределенности параметров заключается в определении некоторой усредненности по объему области неопределенности величины критерия оптимальности, т. е. оценки среднеинтегрального критерия. С этой целью был использован аппарат множественной регрессии и в качестве критерия принято уравнение регрессии второго порядка. В этом случае расчет среднеинтегрального критерия включает в себя следующие этапы: расчет параметров допустимой области; проведение активного эксперимента на модели с целью получения коэффициентов регрессионного уравнения, описывающего зависимость критерия оптимальности от оптимизирующих переменных (неопределенных и точечных) и неопределенных регрессионных параметров; определение величины среднеинтегрального критерия оптимизации.

Согласно алгоритму изменение положения области неопределенности в пространстве оптимизирующих переменных соответствует изменению координат центра композиционного плана второго порядка, минимальные размеры которого определяются величинами интервалов неопределенности параметров оптимизации, а максимальные — величинами интервалов изменения оптимизирующих переменных.

Определение координат точки экстремума регрессионного описания среднеинтегрального критерия проводится следующим образом. Вначале определяются координаты безусловного экстремума по классической схеме. Затем, если найденный экстремум лежит в границах плана, проводится определение характера регрессионной поверхности на основе анализа матрицы Гессе. В качестве нового центра плана выбирается точка экстремума этой поверхности, если таковая имеется. В остальных случаях поиск экстремума в пределах плана осуществляется с помощью оптимизации алгоритмом поиска глобального экстремума и центр нового плана переносится в найденную с его помощью точку.

11.3. Уровень анализа ХТС

На этом уровне имеется возможность проведения активного эксперимента на математических моделях с целью получения упрощенных аппроксимационных моделей или исследования режимов

эксплуатации ХТС при изменении различных параметров. Этот уровень содержит шесть отдельных комплексов программ (см. рис. 11.1) для выполнения следующих функций: генерации плана эксперимента, реализации эксперимента на математических моделях ХТС, анализа чувствительности ХТС, обработки результатов эксперимента, эксергетического анализа ХТС, вывода результатов расчета.

Генерация плана эксперимента. По желанию пользователя генерируются ортогональные планы первого или ортогональные композиционные планы второго порядка заданной степени дробности с учетом требований по несмешенности оценок коэффициентов регрессионных уравнений.

Реализация эксперимента на математических моделях. С использованием уровня автоматизированного моделирования, а при необходимости и уровня синтеза ХТС, осуществляется эксперимент на математических моделях ХТС в соответствии с генерированным планом.

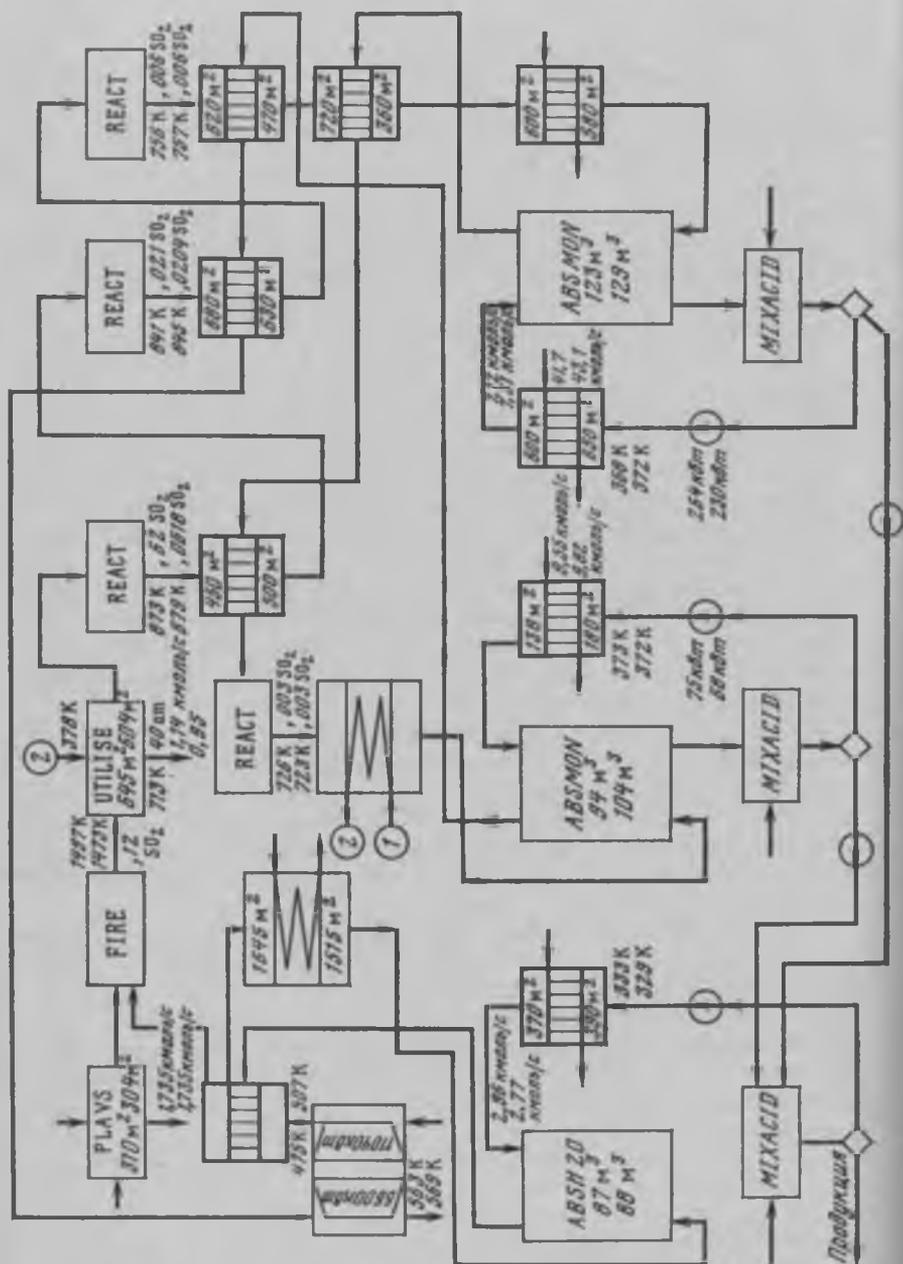
Анализ чувствительности. Проводится на основании расчета якобиана для интересующих пользователя параметров. Каждый элемент якобиана может быть представлен константой или уравнением первого (второго) порядка, что позволяет проводить анализ чувствительности ХТС в широком диапазоне изменения параметров. Следует отметить, что в качестве параметров могут быть использованы и структурные параметры α_{ij} , характеризующие топологию ХТС, т.е. имеется возможность проведения анализа структурной чувствительности ХТС.

Обработка результатов эксперимента. Результаты обрабатываются с целью получения регрессионных уравнений, описывающих зависимости интересующими пользователя параметрами, а также расчета количественных оценок качества аппроксимаций.

Вывод результатов расчета. Имеется возможность вывода информации о проведении и обработке результатов активного эксперимента в табличном и графическом виде.

Эксергетический анализ. В системе предусмотрено определение эксергии и энтальпии технологических потоков, а также эксергетических КПД аппаратов и всей схемы ХТС.

Программное обеспечение АСАС ХТС представляет собой совокупность более 400 взаимосвязанных подпрограмм, расположенных на одном дисковом пакете. Информационное обеспечение представляет собой совокупность семи дисковых файлов, расположенных на том же дисковом пакете и содержащих информацию об имеющихся в системе моделирующих блоках, базу данных для расчета физико-химических свойств компонентов и смесей, а также рабочие файлы уровней синтеза ХТС. В процессе функционирования АСАС ХТС подпрограммы объединяются в многофазовую оверлейную программу, которая работает под управлением ОС ЕС. Структура системы является открытой, т.е. позволяет



подсоединять к ней практически неограниченное количество моделирующих блоков и предусматривает возможность дальнейшего развития функций.

11.4. Разработка технологической схемы производства серной кислоты

Разработанные методы в рамках АСАС ХТС позволяют решать широкий круг задач по модернизации действующих производств и проектированию вновь создаваемых. В качестве примера ниже рассмотрены основные этапы синтеза ХТС производства серной кислоты из серы под давлением [6].

На первом этапе с целью коррекции моделирующих блоков, список которых приведен в табл. 11.4, было проведено моделирование производства серной кислоты из серы под давлением, предложенного фирмой UGINE-KULMAN. Мощность производства составляет 1800 т/сут (рис. 11.4), рабочее давление 5 атм. В качестве основного сырья используется сера, которая плавится в плавилке с помощью насыщенного пара (давление 6 атм). В системе предусмотрено двойное контактирование по схеме III + I.

Воздух, пройдя компрессию до 5 атм и охладившись в теплообменниках, поступает в сушильную башню, где освобождается от влаги. После подогрева он поступает в печь для сжигания серы. На выходе из печи объемная доля сернистого ангидрида составляет 12%. Пройдя котел-утилизатор, в котором генерируется перегретый пар ($P = 40$ атм), газ охлаждается и последовательно проходит три слоя контактной массы (между слоями газ охлаждается в теплообменниках). После охлаждения до 200°C газ поступает на промежуточную абсорбцию, где отводится основное количество сернистого ангидрида, что способствует смещению равновесия реакции окисления сернистого ангидрида в сторону образования серного ангидрида. После подогрева газ поступает еще на один слой катализатора, после чего идет на окончательную абсорбцию и затем на возвратную турбину газотурбинной установки.

Коррекция моделирующих блоков осуществлялась по следующим параметрам: теплообменная аппаратура (плавилка серы, котел-утилизатор, экономайзеры, теплообменники) — по коэффициенту теплопередачи; печь для сжигания серы — по объемному коэффициенту тепловой нагрузки; реактор окисления сернистого ангидрида — по параметру, характеризующему активность катализатора (предэкспонента в выражении для константы скорости реакции); абсорбционная аппаратура — по количеству

Рис. 11.4. Результаты моделирования производства серной кислоты из серы под давлением фирмы UGINE-KULMAN

Таблица 11.4

Условное обозначение	Назначение математического блока	Объем ОП, кбайт	Характеристика математической модели	Количество алгоритмов	Среднее время счета (ЕС-1033), с
MIXER	Моделирование процесса смешения физических потоков ХТС	19,5	Автоматически генерируемые системы нелинейных уравнений материального и теплового балансов (МТБ)	Не фиксировано	$3,5 \pm 1,5$
DIVER	Моделирование процесса разделения физических потоков ХТС	4,0	Автоматически генерируемые системы линейных уравнений МТБ	Не фиксировано	$0,8 \pm 0,2$
HEATRX	Моделирование процесса теплообмена в кожухотрубных теплообменных аппаратах	13,6	Система нелинейных уравнений МТБ без учета изменения агрегатного состояния теплоносителей	21	$2,0 \pm 0,5$
HEATRV		16,8	То же с учетом изменения агрегатного состояния теплоносителей и фазового равновесия	21	$4,5 \pm 1,5$
HEATRC		30,0	То же. Конструкционный расчет	21	$9,0 \pm 3,5$
ECONOM	Моделирование работы экономизера	11,5	Система дифференциальных уравнений МТБ с учетом изменения агрегатного состояния теплоносителей и фазового равновесия	21	60 ± 30
UTILISE	Моделирование работы котла-утилизатора	4,0	Система нелинейных уравнений МТБ	1	$4,5 \pm 1,8$
UTILC		9,1	Система дифференциальных уравнений МТБ с учетом изменения агрегатного состояния теплоносителей и фазового равновесия. Конструкционный расчет	2	360 ± 240

Таблица 11.4 (окончание)

Условное обозначение	Назначение математического блока	Объем ОП, кбайт	Характеристика математической модели	Количество алгоритмов	Среднее время счета (ЕС-1033), с
ABSMON	Моделирование процесса абсорбции в насадочных колоннах	9,3	Ячеечная модель с учетом кинетики абсорбции	6	$7,0 \pm 2,5$
ABSH20		9,1		6	$7,0 \pm 2,0$
MIXACID	Моделирование работы сборника серной кислоты	3,7	Система нелинейных уравнений МТБ с учетом теплот разбавления и смешения	1	$1,2 \pm 0,4$
PLAVS	Моделирование работы бункера-плавилки комовой серы	2,0	Система уравнений МТБ	1	0,3
GASFIRE	Моделирование работы печи для сжигания газообразного топлива	7,3	Система нелинейных уравнений МТБ, автоматически генерируемая в зависимости от алгоритма	2	$1,5 \pm 0,5$
FIRE	Моделирование работы печи для сжигания жидкого топлива	13,8	Автоматически генерируемые системы линейных и нелинейных уравнений	2	$1,5 \pm 0,5$
PUMP	Моделирование работы центробежных насосов и газодувок	0,9	Система уравнений МТБ и уравнений гидравлики	1	0,2
COMPR	Моделирование работы одноступенчатого компрессора	3,9	Расчет компрессора	1	$0,7 \pm 0,3$
COMPRN	Моделирование работы многоступенчатого компрессора	3,8	То же	1	$0,9 \pm 0,4$
RCTS02P	Моделирование работы адиабатического каталитического реактора окисления SO_2 в SO_3	27,2	Система уравнений МТБ с учетом кинетики каталитического окисления	5	$5,0 \pm 2,2$
RCTS02PC		31,1	То же, что и RCTS02P. Система уравнений конструкционного расчета	5	$8,0 \pm 3,5$

ячеек в модели структуры потоков; насосы — по общему КПД; сборники кислот — по времени пребывания кислоты в сборниках; газотурбинная установка — по КПД компрессора и турбин. Моделирующие блоки «Разделитель» и «Смеситель» коррекции не требовали.

Результаты коррекции приведены на рис. 11.4. Все расходы указаны в кмоль/с, температура — в °С, концентрации сернистого ангидрида — в молярных долях. Эти результаты свидетельствуют, что максимальный разбаланс по параметрам технологических потоков и параметрам оборудования не превышает 10%, а в среднем составляет менее 5%.

Задача синтеза формулируется следующим образом. Разработать оптимальную в смысле минимума приведенных затрат ХТС производства серной кислоты из серы под давлением при исходных данных: производительность 2000 т/сут, выброс SO_2 в газе не более 0,0002 молярной доли, выброс SO_3 в газе не более 0,0002 молярной доли, для компрессии газа и использования энергии возвратных газов используется газотурбинная установка ГТТ-12 (COMPR), допускается использование до пяти слоев контактной массы (RCTS02); до пятнадцати теплообменников (HEATER><); до трех котлов-утилизаторов (UTILISE); одной печи для сжигания природного газа в целях подогрева отходящих газов перед подачей их на возвратную турбину (GASFIRE). Кроме того, в схеме должны использоваться плавилка серы (PLAVS); печь для сжигания серы —(FIRE); сушильная башня (ABSH20); два моногидратных абсорбера (ABSMON); сборники кислот (MIXACID); насосы для перекачки жидкостей (PUMP); разделители и смесители потоков (DIVER, MIXER).

В качестве основных оптимизирующих переменных выбраны температура газа на входе в слои контактной массы, концентрация SO_2 на выходе из слоев контактной массы, концентрация SO_2 на выходе из печи для сжигания серы, степень абсорбции SO_2 в моногидратных абсорберах, структурные параметры α_{ij} .

Нетрудно видеть, что при такой постановке задачи синтеза принципиально могут быть синтезированы, а следовательно, и проанализированы практически все возможные варианты оформления сернокислотного производства. Например, схемы с одинарным и двойным контактированием при различном наборе слоев катализатора до и после абсорбции, различные варианты теплообмена и т. п.

В то же время следует отметить, что непосредственное применение интегрально-гипотетического принципа к решению задачи синтеза этого производства потребовало бы отыскания значений более 1000 оптимизирующих переменных (в том числе и структурных), что объясняется достаточно большим количеством аппаратов. Однако использование различных эвристических правил, разработанных применительно к решению данной задачи на осно-

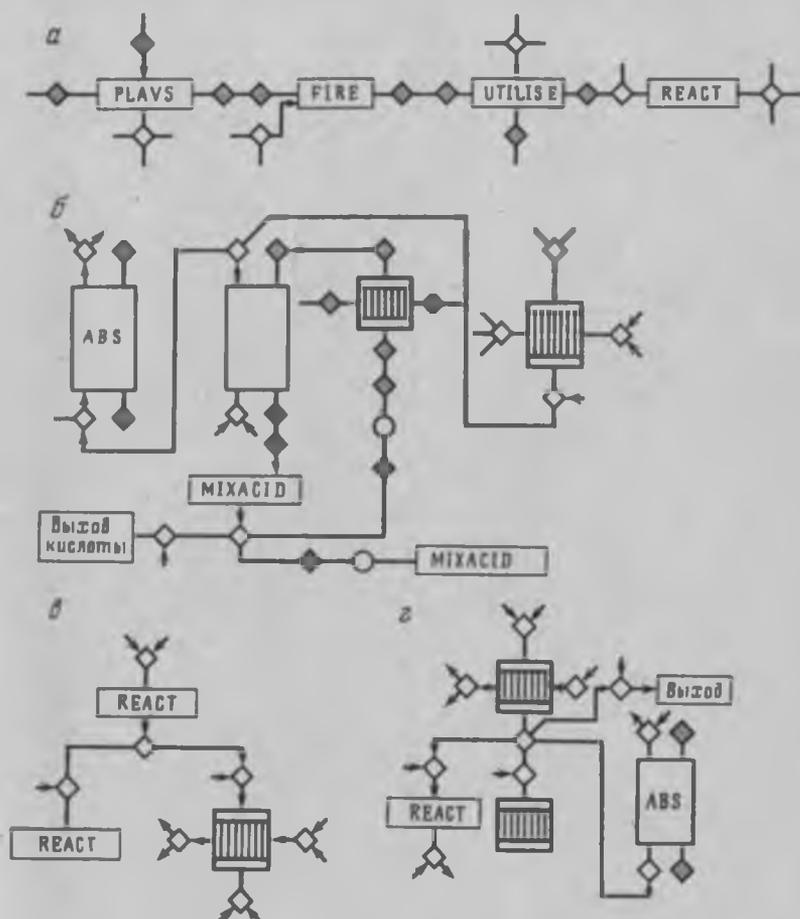


Рис. 11.5. Эвристические правила синтеза ХТС производства серной кислоты

вании опыта и интуиции технологов и проектировщиков, позволяет существенно снизить размерность задачи. Символическое изображение основных из этих правил приведено на рис. 11.5. Например, правило на рис. 11.5, а следует читать следующим образом: газ, выходящий из слоя контактной массы (RCTS02), может поступать только на вход другого слоя контактной массы (RCTS02) или на вход теплообменника. Понятно, что использование этого и других правил позволило существенно уменьшить количество возможных связей в системе и соответственно количество неизвестных структурных параметров α_{ij} . Кроме того, при синтезе данной ХТС оправданным является использование правила непересечения потоков с различным агрегатным состоянием, т.е. потоки с различ-

Таблица 11.5

Показатель	Схема	
	ГГИНЕ- KULMAN	предлагаемый вариант
Мощность, т/сут	1800	2000
Давление, атм	5,0	12,0
Молярная доля SO ₂ в выбросе, %	0,03	0,013
Молярная доля SO ₂ в выбросе, %	0,02	0,012
Капитальные вложения, руб.	9,447·10 ⁶	12,234·10 ⁶
Стоимость на единицу продукции, руб./т сырья	21,02	20,98
вспомогательных материалов	0,90	0,81
используемых отходов энергии	3,20	3,45
Полная себестоимость на единицу продукции, руб./т	0,92	-0,78
Приведенные затраты на единицу продукции, руб./т	22,26	20,31
	24,17	22,53

ным агрегатным состоянием не могут входить в один и тот же смеситель (MIXER), хотя и могут встречаться внутри отдельных аппаратов (например, в абсорбере). Применение всех этих правил, легко формализуемых через задание структурных параметров α_{ij} , позволило привести задачу синтеза к такому виду, когда общее количество оптимизирующих переменных не превышало 30.

В результате синтеза схемы получены следующие результаты: а) получена технологическая схема производства серной кислоты мощностью 2000 т/сут, соответствующая минимуму приведенных затрат (рис. 11.6); б) получены параметры технологических потоков: расходы, температуры и концентрации компонентов, основные из которых приведены на рис. 11.6; в) получены параметры технологического оборудования синтезированной технологической схемы: объемы контактной массы, площади теплообменной аппаратуры, объемы насадок в абсорберах, мощности насосов и т.п. (см. рис. 11.6); г) выполнен расчет статей приведенных затрат, включая преysкурантную стоимость оборудования, капитальных затрат на объекты основного производственного назначения и общих капитальных вложений, а также затрат по отдельным статьям себестоимости и полной себестоимости продукции.

Рис. 11.6. Оптимальная ХТС производства серной кислоты из серы под давлением

В табл. 11.5 приведены основные технико-экономические показатели синтезированной схемы производства в сравнении со схемой производства фирмы UGINE-KULMAN.

Из таблицы следует, что полученный вариант схемы производства является более предпочтительным по экономическим характеристикам.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Золотарев В. В.* Разработка и применение автоматизированной системы анализа и синтеза химико-технологических систем: Автореф. дис. ... канд. техн. наук. М.: МХТИ, 1980. 23 с.
2. *Золотарев В. В., Гарнов В. В., Богданов В. И.* Лабораторные работы по автоматизированному проектированию химико-технологических систем. М.: МХТИ, 1984. 48 с.
3. *Кафаров В. В., Золотарев В. В., Богданов В. И.* Метод обратной интерполяции для решения систем нелинейных уравнений // ТОХТ. 1984. Т. 18, № 1. С. 78—83.
4. *Klemes J., Klemes J., Lutcha J. et al.* // Paper presented at Symposium on computers in the design and erection on chemical plants. Karlovy Vary, 1975. P. 627—638.
5. *Кафаров В. В., Золотарев В. В., Воротников А. Г.* и др. Блок экономической оценки новых химико-технологических систем // Промышленность минеральных удобрений и серной кислоты. М.: НИИТЭХИМ, 1978. Вып. 4. С. 1—4.
6. *Кафаров В. В., Золотарев В. В., Михайлов Г. В.* и др. Синтез химико-технологической системы производства серной кислоты из серы под давлением // Хим. пром-сть, 1981. № 9. С. 548—551.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Автоматизация проектирования и внедрение САПР в практику повседневной работы проектных организаций является магистральным направлением создания новых технологий, повышения интеллектуальных возможностей проектировщика, производительности его труда, точности проектных решений, основанных на возможности анализа большого числа вариантов и выборе оптимального, сокращения сроков создания новых объектов. В этом смысле САПР оказывает и будет оказывать все более глубокое воздействие как на сам процесс проектирования, так и на научные исследования в целом, поскольку должна ориентировать пользователя (проектировщика) не на выбор некоторого варианта проекта из стандартного набора, а на создание нового объекта, основанного на анализе существующего уровня развития материальной и технической базы, а также реальных прогнозов их развития. Для решения этой задачи недостаточно простого набора вариантов проекта, алгоритмов их оценки, а необходимо представить пользователю дополнительные возможности строить новые алгоритмы, особенно в тех частях проекта, которые изменяются в процессе проектирования. Такая САПР, очевидно, должна обладать способностями «интеллектуальности» и «эволюционности», так как проектирование как область интересов человека неотделимо от творчества.

Основной концепцией, используемой при создании большинства САПР, является ориентация на традиционную последовательность выполнения проектных разработок и поэтому они незначительно меняют структуру проектной организации. По существу функции отделов автоматизируются или механизмируются на уровне отдельных подсистем с полной или частичной интеграцией с другими подсистемами. Если учесть, что при создании проекта должно осуществляться тесное взаимодействие со смежными проектными, конструкторскими, научно-исследовательскими и другими организациями, то становятся очевидными причины низкой эффективности применения отдельных САПР даже при наличии высоких показателей по отдельным частям проекта. Отсюда следует необходимость разработки теории и методологии автоматизированного проектирования и, следовательно, изменения структуры проектной организации, иначе разработчик «встраивает» в систему недостатки существующей практики создания проекта.

В качестве основополагающей концепции разработки САПР следует принять концепцию системного подхода, основанного

на комплексном рассмотрении проблемы с учетом влияния иерархии отдельных этапов процесса проектирования (подсистем) на проект в целом. Например, в рамках технологического проектирования САПР должна объединить в единое целое получение данных на проектирование, собственно проектирование единиц технологической схемы и проектирование системы управления, т. е. объединение АСНИ—САПР—технология—САПР АСУТП. Наличие такого объединения уже предполагает принципиально иную структуру проектной организации, а с точки зрения разработки проекта — оперативное получение необходимой информации по недостающим физико-химическим, термодинамическим и другим данным, по параметрам используемых моделей, по структуре технологической схемы с учетом задач управления. При этом важно, чтобы методология построения САПР обеспечивала несложную стыковку с другими системами проектирования (компоновка оборудования, трассировка трубопроводов, строительная часть и т. д.).

Итак, развитие методологии разработки САПР предполагает интеграцию функционально различных систем в единое целое, причем последние объединяются путем объединения соответствующих ЭВМ, т. е. САПР должна реализоваться на основе сети ЭВМ. Аналогичный подход справедлив и в отношении информационного обеспечения, так как нет необходимости в концентрировании оперативной и статической информации в рамках единого банка данных. Сеть ЭВМ обеспечивает оперативный обмен информацией с центральным банком данных, со всеми ЭВМ сети, обрабатывающими устройствами и подсистемами; одновременную обработку одной задачи на нескольких ЭВМ; использование ресурсов всех подключенных к сети ЭВМ. Если учесть все более широкое распространение микропроцессорной техники, то в перспективе распределенная обработка данных (на уровне АСНИ, САПР, АСУТП) будет иметь все более важное значение.

В соответствии с принятой в данной работе методологией создания САПР можно выделить три основные функциональные части, разработка которых способствует получению все более мощных систем. Это информационное обеспечение системы, прикладное программное обеспечение и обеспечение диалогового взаимодействия пользователя с системой. Ясно, что решения по данным вопросам должны проводиться в рамках существующих технических и системных программных средств с учетом преемственности по мере совершенствования последних. Пожалуй нет необходимости возлагать на разработчика прикладной САПР решение задач системного программного обеспечения, однако в своей работе он должен ориентироваться на современное состояние и перспективы развития последнего.

Полнота информационного обеспечения САПР и достоверность данных, особенно для новых технологий, является основопо-

лагающим фактором достоверности получаемых проектных решений. И здесь главное направление дальнейшего развития связано с разработкой новых методов расчета свойств, их экспериментального определения, накопления и обновления по мере совершенствования теоретической и экспериментальной базы. Повышение эффективности инструментальных методов получения и обработки данных непосредственно связано с широким и оперативным использованием АСНИ. В этом направлении предстоит решить ряд сложных проблем как теоретического, так и программно-математического характера.

Фундаментальная проблема разработки САПР заключается в формировании прикладного математического обеспечения. Отсутствие физического аналога процесса на стадии проектирования предъявляет высокие требования к его математической модели. Математическая модель процесса на стадии проектирования является не только многофункциональной, но и имеет переменную структуру в зависимости от гидродинамических, кинетических и иных условий ее применения. Поэтому при разработке модели следует исходить по возможности из общих методов восприятия и преобразования данных, в рамках же САПР модель трансформируется в зависимости от конкретных условий приложения, т. е. «подстраивается» под ситуацию. Основным принципом конструирования таких моделей является модульность. Модель представляется в виде совокупности отдельных элементов, структурированных на основе физических (гидродинамика, кинетика, равновесие и т. д.) или иных (удобство, относительная независимость и т. д.) соображений. Эффективность применения такой модели будет зависеть от способа структурирования и организации интерфейса между модулями. И опять оперативная оценка параметров конкретного варианта модели невозможна без применения АСНИ.

Другая сторона проблемы формирования прикладного математического обеспечения заключается в многообразии вариантов реализации технологических схем как совокупности отдельных процессов. Следует заметить, что эта задача возникает не только при выборе технологической схемы, она может появиться и при выборе модели, конструкции аппарата, маршрута реакции химического превращения, когда информация о структуре последних нечеткая.

Существуют различные подходы к решению этих задач, в частности, формирование предписанной последовательности алгоритмов для решения конкретных проектных задач на основе как отдельных алгоритмов, так и метаалгоритмов, создание вычислительной схемы в соответствии с топологией проектируемого объекта, применение алгоритмов синтеза различной природы и т. д. Сюда же можно отнести и экспертные системы, получившие широкое распространение в ряде технических и коммерческих при-

ложений, основанные на использовании неформализуемого в рамках алгоритмических языков программирования опыта работы специалистов, однако легко реализуемого на логических языках программирования. Современный уровень развития средств вычислительной техники позволяет успешно сочетать различные подходы к решению проблемы автоматизации проектирования, в частности, объединение традиционных алгоритмических методов и методов, основанных на использовании нечеткой информации типа эвристик, экспертных и прогностических оценок. Такие системы обладают большей гибкостью, приспособляемостью к классу решаемых задач и являются примером дальнейшего развития методологии создания САПР как интеллектуальных систем.

На современном этапе разработки методологии САПР идет процесс накопления «базы знаний» с тем, чтобы перейти к автоматизации проектирования как к решению задач искусственного интеллекта и распознавания образов. Предпосылками этого являются «интеллектуальные» ЭВМ, достигнутые успехи в области обеспечения диалога на естественных языках, уровень проработки прикладного математического обеспечения. Создание таких систем является перспективой развития и совершенствования САПР.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие	3
-----------------------	---

I

ПРОЦЕСС ПРОЕКТИРОВАНИЯ КАК ОБЪЕКТ АВТОМАТИЗАЦИИ

Глава 1

Состав и содержание проектных документов	7
1.1. Нормативные документы и стадии проектирования	8
1.2. Организация проектных работ	14
1.3. Содержание проекта	21

Глава 2

Методология автоматизации проектирования химических производств	24
2.1. Декомпозиция задачи проектирования	27
2.2. Функциональная структура системы автоматизированного проектирования	29
2.3. Технологическое проектирование	42
2.4. Общетеchnическое проектирование	44
Литература	51

Глава 3

Проектирование автоматизированных систем научных исследований	52
3.1. Экспериментальные исследования в САПР	56
3.2. Принципы построения АСНИ в химической технологии	63
3.3. Программное обеспечение АСНИ	65
3.4. Технические средства АСНИ	68
Литература	72

II

РАЗРАБОТКА СИСТЕМ АВТОМАТИЗИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

Глава 4

Общие вопросы построения систем автоматизированного проектирования	73
4.1. Системный анализ в решении задач проектирования	73
4.2. Алгоритмизация этапов проектирования химических производств	110
4.3. Функциональная структура системы автоматизированного проектирования	147

4.4. Принципы построения систем автоматизированного проектирования	166
4.5. Экономическая эффективность систем автоматизированного проектирования	170
Литература	172
Глава 5	
Информационное обеспечение систем автоматизированного проектирования	176
5.1. Состав и источники данных информационной базы САПР	176
5.2. Организационная структура информационного обеспечения	187
5.3. Проектирование баз данных	209
5.4. Требования к СУБД систем автоматизированного проектирования	222
Литература	231
Глава 6	
Технические средства систем автоматизированного проектирования	232
6.1. Архитектура технических средств	241
6.2. Системное математическое обеспечение	246
Литература	254
Глава 7	
Прикладное математическое обеспечение систем автоматизированного проектирования	254
7.1. Технологический цикл разработки модели	257
7.2. Общие вопросы построения пакетов прикладных программ	265
7.3. Математические модели типовых процессов химической технологии	284
7.4. Пакеты прикладных программ для расчета типовых процессов химической технологии	387
7.5. Аппроксимационные математические модели	424
Литература	430
Глава 8	
Автоматизированный синтез технологической схемы химического производства	435
8.1. Методы синтеза технологической схемы	436
8.2. Синтез схем химического превращения	442
8.3. Синтез теплообменных систем	452
8.4. Синтез систем разделения	471
8.5. Синтез технологической схемы разделения алкилбензолов в производстве кумола	500
8.6. Синтез технологической схемы получения винилацетата	509
Литература	518
Глава 9	
Гибкие автоматизированные производственные системы химической технологии	520

9.1. Общесистемные свойства ГАПС	524
9.2. Математическое формулирование задачи синтеза ГАПС	531
9.3. Синтез совмещенных схем для производства пентафталеновых эмалей ПФ-115 в лакокрасочной промышленности	547
Литература	557

III

**ПРАКТИЧЕСКОЕ ПРИМЕНЕНИЕ САПР
ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ**

Глава 10

Система автоматизированного проектирования производств нефтехимической и нефтеперерабатывающей промышленности (САПР «Нефтехим»)	558
10.1. Состав и структура САПР «Нефтехим»	558
10.2. Подсистема «Технология»	563
10.3. Подсистема проектирования технологических схем ИИЗ	571
10.4. Подсистема проектирования трубопроводных систем	572
10.5. Подсистема проектирования контроля и автоматики	575
10.6. Подсистема проектирования технологического оборудования	578
10.7. Подсистема общестроительного проектирования	580
10.8. Подсистема «Комплектация»	581
10.9. Подсистема проектирования систем хладоснабжения	583
10.10. Подсистема «Графика»	584
10.11. Техническое и информационное обеспечение САПР «Нефтехим»	585
Литература	587

Глава 11

Автоматизированная система анализа и синтеза ХТС	588
11.1. Концепции построения уровня автоматизированного моделирования ХТС	588
11.2. Разработка уровня синтеза ХТС	602
11.3. Уровень анализа ХТС	606
11.4. Разработка технологической схемы производства серной кислоты	609
Литература	616
Заключение	617

**Виктор Вячеславович Кафаров
Валентин Николаевич Ветохин**

**ОСНОВЫ
АВТОМАТИЗИРОВАННОГО
ПРОЕКТИРОВАНИЯ
ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ**

**Утверждено к печати
Отделением информатики, вычислительной
техники и автоматизации**

**Редактор Я. Б. Улановский
Редактор издательства В. В. Яценко
Художник И. И. Каледин
Художественный редактор Н. Н. Власик
Технический редактор В. В. Тарасова
Корректоры Р. Э. Землянская, Л. В. Лукичева**

ИБ № 31152

**Сдано в набор 30.01.87.
Подписано к печати 03.07.87.
Т-05751. Формат 60×90^{1/16}.
Бумага типографская № 1.
Гарнитура обыкновенная
Печать высокая
Усл. печ. л. 39. Усл. кр. отт. 39. Уч.-над. л. 42,5
Тираж 5250 экз. Тип. зак. 317
Цена 4 р. 60 к.**

**Ордена Трудового Красного Знамени
издательство «Наука»
117864, ГСП-7, Москва, В-485,
Профсоюзная ул., 90**

**2-я типография издательства «Наука»
121099, Москва, Г-99, Шубинский пер., 6**