

Методичні вказівки з організації самостійної роботи з дисципліни «Методи досліджень хіміко-технологічних систем і процесів»

У підготовці магістрів за спеціальністю “Хімічна технологія та інженерія” дисципліна «Методи досліджень хіміко-технологічних систем і процесів» є важливим світоглядним курсом, мета якого полягає в наданні теоретичних і практичних знань з методів математичного планування експерименту, моделювання хіміко-технологічних процесів на різних масштабних рівнях хіміко-технологічних систем, основ системного аналізу в хімічній технології, розрахунку, аналізу, синтезу, оптимізації і керуванню процесами хіміко-технологічних систем.

Для досягнення поставленої мети студенту необхідно ознайомитись з загальними вимогами до експерименту, математичного моделювання і системного аналізу, як методів досліджень в хімічній технології; опанувати методи математичного планування експерименту і його застосування для оптимізації хіміко-технологічних процесів; ознайомитись з статистичними і детермінованими моделями ХТП; розуміти методологію математичного опису хімічних реакцій і хіміко-технологічних процесів; опанувати закономірності масо- і теплообмінних процесів; навчитись використовувати методи системного аналізу для розрахунків, аналізу і синтезу хіміко-технологічних систем; ознайомитись з алгоритмами керування ХТС; опанувати поняття хіміко-технологічного комплексу, його життєвого циклу, стратегію і принципи його дослідження.

Планування самостійної роботи

№ з/п	Назва теми та види самостійної роботи студента	Кількість годин
1	Підготовка до аудиторних занять: – проробка лекційного матеріалу; – підготовка до лабораторних робіт; – підготовка до практичних занять.	36 (0,5 год. на 1 год. ауд. занять)
2	Проробка розділів, які не викладаються на лекціях: 1. <i>Типові задачі синтезу, аналізу і керування ХТС;</i> 2. <i>Математичний опис елементів хіміко-технологічної системи і її розрахунок;</i> 3. <i>Оптимізація хіміко-технологічних процесів;</i> 4. <i>Топологічні моделі ХТС і топологічний метод їх аналізу;</i> 5. <i>Алгоритми керування ХТС.</i>	30 (3 год. на 1 год. лекції, яка передбачається)
3	Виконання та захист індивідуальних завдань – Підготовка за захист курсової роботи	30
4	Підготовка та складання підсумкового контролю знань	42

Поняття хіміко-технологічного процесу (ХТП)

Хіміко-технологічний процес – це сукупність фізичних, хімічних та фізико-хімічних стадій переробки сировини в цільовий продукт.

В ХТП послідовно реалізуються стадії підготовки сировини, її хімічної (або частіше фізико-хімічної) переробки та виділення готової хімічної продукції. Від досконалості кожної з цих операцій залежать як технологічні, так і техніко-економічні показники виробництва. Не применшуючи значення стадій підготовки сировини та обробки готової продукції, відзначимо, що з позицій хімічної технології найбільше значення має процес власне хімічної переробки сировини в продукт виробництва.

Сумарна швидкість ХТП визначається швидкістю перерахованих елементарних стадій. Як правило, ці елементарні процеси протікають з різною швидкістю і послідовно. Тому загальна (сумарна) швидкість процесу лімітується швидкістю найбільш повільної стадії. Якщо найбільш повільно відбувається сама хімічна реакція, і вона лімітує сумарну швидкість, то процес протікає в кінетичній області. Для прискорення таких процесів технології змінюють ті чинники, які найбільше впливають на швидкість хімічної реакції, збільшуючи, наприклад, концентрацію вихідних компонентів, температуру, тиск, застосовуючи каталізатори. Якщо загальну швидкість процесу лімітує підведення реагуючих компонентів або відведення продуктів реакції, то процес протікає в дифузійній області. Для прискорення таких процесів прагнуть збільшити швидкість дифузії посиленням перемішування, диспергуванням фаз, підвищенням температури, концентрації і т.п.

Знання основних закономірностей хімічної технології дає можливість встановити оптимальні умови процесу, проводити його найбільш ефективно з максимальним виходом, забезпечити одержання продуктів високої якості. Технолог користується основними закономірностями при аналізі існуючого виробництва для його поліпшення і особливо при організації нового процесу.

Поняття хіміко-технологічної системи (ХТС)

Хіміко-технологічна система – це сукупність апаратів, зв'язаних між собою потоками і функціонуючих як єдине ціле. У кожному апараті (елементі по термінології теорії систем) відбувається перетворення потоку (змішування, поділ, подрібнення, нагрівання, перетворення енергії, стиск, розширення, хімічне перетворення, випаровування тощо). Потоки (або зв'язки за термінологією систем) забезпечують передачу речовини або енергії між апаратами (елементами системи) і можуть бути матеріальними, тепловими, енергетичними та інформаційними. Вивчення систем (у тому числі ХТС) проводиться методами теорії систем.

Типові задачі синтезу, аналізу і керування ХТС

Синтез ХТС представляє собою завдання вибору способу отримання заданого хімічного продукту з різних видів сировини, енергії, технологічного

обладнання і з різних шляхів хімічних перетворень. Через великі розміри такого завдання необхідно проводити декомпозицію загальної проблеми. Завдання синтезу не можуть бути повністю формалізовані. Вони потребують творчої участі інженера. Досвід інженерів-проектувальників узагальнено і формалізовано у вигляді евристик – сукупності правил, алгоритмів і концепцій створення ХТС. Основні етапи синтезу ХТС:

1. Синтез структури і вибір головних елементів системи. Кінцева мета цього етапу – складання технологічної схеми.

2. Складання матеріальних і енергетичних балансів і попередній розрахунок ХТС. Мета цього етапу – специфікація підсистем, визначення їх параметрів і розмірів основних елементів.

3. Розрахунок і оптимізація ХТС. Визначають остаточні значення всіх потоків і головних розмірів елементів ХТС.

4. Модифікація ХТС для поліпшення ряду її властивостей, які не були враховані раніше.

5. Синтез системи автоматизованого управління.

Після стадії синтезу ХТС слідує етап її аналізу. Задачі **аналізу ХТС** полягають в одержанні відомостей про функціонування системи в залежності від прийнятої хімічної схеми, структури технологічних зв'язків між елементами і підсистемами, а так само від конструкційних і технологічних параметрів, виходячи з заданих властивостей і показників функціонування, що мають оптимальне значення. Для цього необхідні:

а) *технологічний аналіз ХТС* – одержання технологічних показників: температури, тиску, розмірів потоків, виходу селективності, кількості відходів тощо;

б) *техніко-економічний аналіз ХТС* – одержання економічних критеріїв оцінки ефективності системи – видаткових коефіцієнтів, витрат на виробництво продуктів і, у кінцевому рахунку, одержання відомостей про собівартість продукції;

в) *аналіз функціонування системи* (наприклад, визначення таких параметрів, як сталість, надійність, безпека роботи ХТС тощо).

Аналіз ХТС здійснюється при розробці і проектуванні системи для визначення її ефективності, а також для порівняння різних варіантів реалізації процесу з метою вибору з них оптимального. Аналіз використовується і при модернізації і реконструкції діючих ХТС. Показники роботи ХТС визначаються в результаті рішення систем рівнянь матеріальних і теплових балансів.

Завдання **управління ХТС** розглядають як на стадії проектування ХТС, так і в період її експлуатації. До завдань управління в період експлуатації ХТС відносять в першу чергу аналіз збурень системи. В залежності від частоти прояви цих збурень, розрізняють різні рівні управління. Наприклад, якщо час збору інформації про вплив збурення занадто великий, щоб своєчасно запобігти негативному ефекту такого збурення, то використовують оперативне управління ХТС.

Алгоритми керування ХТС

Поняття алгоритм (від лат. *algorithmus*) трактується як сукупність дій (правил) для вирішення поставленого завдання. Цьому терміну дав життя узбецький математик Мухамед-ібн-Сус(арабською – аль Хорезмі).

У сучасній хімічній технології очевидна тенденція до підвищення швидкостей ХТП за рахунок зростання температури, тиску і концентрації. Результатом цього є не тільки зростання виходу цільових продуктів, але і підвищення чутливості ХТС до збурень. Очевидно, що підвищуються вимоги також і до якості систем автоматизованого управління, стабілізації і захисту. Також очевидно і зворотне: з підвищенням рівня автоматизації хіміко-технологічних установок можна істотно підвищити ефективність хімічних виробництв. Таким чином, існує тісний взаємозв'язок між автоматизацією і технологією.

Завдання управління визначаються динамічними і статичними властивостями об'єктів управління і збурення, що діє на об'єкт управління. Формулювання завдань управління відноситься до найскладніших питань при проектуванні АСУТП. В наш час АСУТП є, по суті, частиною сучасних ХТС. Тому завданнями першорядної важливості для сучасних хіміко-технологічних установок вважають: автоматичну оптимізацію, автоматичну стабілізацію і автоматичний захист виробництва від аварійних ситуацій (тобто захист від впливу тих збурень, які не піддаються компенсації штатною системою стабілізації).

При розробці алгоритмів керування ХТС властивості збурень, що діють на об'єкт, як правило, в повному обсязі невідомі. Якщо природа збурень відома і сформульовано завдання автоматизації, то вдається побудувати математичну модель об'єкта управління. На жаль, такі моделі настільки складні, що їх не вдається вирішити в реальному масштабі часу. Тому завдання управління доводиться спрощувати і поділяти на кілька відносно незалежних підзадач. При цьому такі завдання необхідно конкретизувати під кожен ХТС.

Питання до самостійної та контрольної роботи

1. Загальні відомості про методи досліджень ХТП і ХТС.
2. Поняття ХТП і ХТС як моделей хімічного виробництва.
3. Методи вивчення закономірностей ХТП.
4. Системний аналіз в хімічній технології.
5. Показники ефективності хімічного виробництва та його моделей.
6. Експеримент як базовий метод дослідження в хімічній технології.
7. Загальні відомості про експериментальні дослідження ХТП.
8. Основи математичної теорії експерименту.
9. Поняття випадкових величин та їх характеристик.

10. Поняття залежних і незалежних випадкових величин.
11. Поняття рандомізації експериментів.
12. Відтворюваність експериментів.
13. Метод математичного планування експерименту в хімії і хімічній технології.
14. Пасивний та активний експеримент.
15. Математичний опис та планування багатofакторного експерименту.
16. Дробовий факторний експеримент.
17. Інтерпретація рівнянь регресії.
18. Використання факторного експерименту для оптимізації ХТП.
19. Методи крутого сходження та спуску.
20. Метод симплекса.
21. Метод центрального композиційного планування експерименту.
22. Контурно-графічний аналіз поверхні відгуку.
23. Загальні відомості про моделювання як методу досліджень в хімічній технології.
24. Класифікація моделей хімічних процесів.
25. Детерміновані і статистичні моделі ХТП.
26. Етапи математичного моделювання ХТП.
27. Ієрархічні моделі та їх призначення.
28. Математичний опис (моделювання) хімічних реакцій.
29. В чому полягає основна задача технологічних розрахунків з використанням стехіометричних рівнянь хімічних реакцій?
30. Закон стехіометричних співвідношень.
31. Поняття “хімічної змінної” реакції.
32. Поняття простих і складних хімічних реакцій. Наведіть приклади.
33. Алгебраїчна форма рівняння хімічної реакції.
34. Поняття «базисна система стехіометричних реакцій». Її призначення і правила складання.
35. Як отримують кінетичні рівняння – експериментально чи теоретично? Чим визначається кількість кінетичних рівнянь для хімічного перетворення?
36. Схема перетворення речовин і її призначення.
37. Поняття швидкості перетворення речовин і швидкості хімічної реакції. Виведіть формулу зв'язку між швидкістю перетворення речовин і швидкістю хімічної реакції.

38. Гомогенні хімічні процеси: залежність швидкості простої необоротної реакції від концентрації вихідної речовини, її ступеню перетворення і температури.
39. Гомогенні хімічні процеси: залежність швидкості оборотної реакції від концентрації і ступеню перетворення вихідної речовини.
40. Гомогенні хімічні процеси: залежність швидкості оборотних екзотермічних і ендотермічних реакцій від температури.
41. Інтенсифікація процесів для оборотних екзотермічних і ендотермічних реакцій.
42. Гомогенні хімічні процеси: залежність селективності складних хімічних реакцій від концентрації вихідної речовини і температури.
43. Гетерогенні хімічні процеси типу “газ (або рідина) – повністю реагуючий твердий реагент”: схема, структура і математична модель процесу в таких системах, залежність швидкості перетворення реагентів від температури і швидкості потоку в таких системах. Способи інтенсифікації процесу.
44. Принципи побудови математичних моделей процесів у хімічних реакторах. Рівняння матеріального і теплового балансів хімічних реакторів у загальному вигляді.
45. Математичні моделі реакторів ідеального змішування періодичної дії, ідеального змішування безупинної дії і ідеального витиснення в умовах ізотермічного режиму процесу.
46. Порівняння безупинних процесів у РІЗ-б і РІВ в ізотермічних умовах протікання хімічного процесу.
47. Каскади послідовно і паралельно з’єднаних хімічних реакторів ідеального витиснення і ідеального змішування.
48. Поняття хіміко-технологічної системи. Етапи вивчення ХТС.
49. Основні поняття і визначення системного підходу в дослідженні ХТС. Поняття “технологічного режиму”, “параметрів потоку” і “стану елементу ХТС”.
50. Поняття розрахунку ХТП та аналізу ХТП. В чому полягає складність аналізу ХТП? Наведіть приклади.
51. Структура ХТС: види зв’язку між елементами ХТС.
52. Матеріальні і теплові баланси як основа розрахунків ХТС. Застосування законів збереження маси та енергії до процесів хімічного виробництва.
53. Математичне моделювання як метод дослідження хімічних процесів і реакторів. Чим фізичне моделювання відрізняється від математичного моделювання?
54. Ієрархічна модель процесу в хімічному реакторі. Поняття хімічного процесу і його відмінність від хімічної реакції.

55. Описові і графічні моделі ХТС: хімічна, операційна, математична, функціональна, технологічна, структурна та спеціальні.
56. Принципи розроблення хіміко-технологічних систем. Сучасні концепції створення ХТС: повного використання сировини, повного використання енергетичних ресурсів, комбінування хіміко-технологічних процесів, енерготехнологічних систем, мінімізації відходів, ефективного використання обладнання, суміщення ХТП в одному апараті, перебудовування ХТС.

РЕКОМЕНДОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Химко-технологические системы: Синтез, оптимизация, управление / Под ред. И.П. Мухленова – Л.: Химия, 1986. – 424 с.
2. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. – М.: Химия, 1985. – 448 с.
3. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов. – М.: Химия, 1982. – 288 с.
4. Бондарь А.Г. Математическое моделирование в химической технологии. – Киев: Выща школа, 1973. – 279 с.
5. Бондарь А.Г., Статюха Г.А. Планирование эксперимента в химической технологии. Основные положения, примеры и задачи – Киев: Вища школа, 1976. – 219 с.
6. Рузинов Л.П., Слободникова Р.И. Планирование эксперимента в химической технологии. – М.: Химия, 1980. – 280 с.
7. Кутепов А.М., Бондарева Т.И., Беренгартен М.Г. Общая химическая технология. Учебник. – М.: Высш. шк., 1990. – 520 с.
8. Общая химическая технология. Учебное пособие / Под ред. проф. А.В. Амелина. – М.: Химия, 1977. – 400 с.
9. Царева З.М., Орлова Е.И. Теоретические основы химической технологии. Учебное пособие. – Киев: Выща шк., 1986. – 260 с.
10. Расчеты химико-технологических процессов. Учебное пособие / Под ред. И.П. Мухленова. – Л.: Химия, 1982. – 248 с.
11. Бесков В.С., Сафронов В.С. Общая химическая технология и основы промышленной экологии. – М.: Химия, 1999. – 470 с.
12. Левеншпиль О. Инженерное оформление химических процессов. – М.: Химия, 1969. – 622 с.
13. Кафаров В.В., Глебов М.К. Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: «Высшая школа», 1991. – 400 с.
14. Холоднов В.А., Хартманн К., Чепикова В.Н., Андреева В.П.. Системный анализ и принятие решений. Компьютерные технологии моделирования химико-технологических систем с материальными и тепловыми рециклами. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2006. –160 с.