

**Истомин Андрей Леонидович,**

д.т.н., профессор, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: a.l.istomin@mail.ru

**Кривов Максим Викторович,**

к.т.н., доцент, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: vmk@angtu.ru

**Истомина Алена Андреевна,**

к.т.н., доцент, Ангарский государственный технический университет,

e-mail: alenaist@yandex.ru

## **РАЗРАБОТКА ПРОГРАММНО-ТЕХНИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА ДЛЯ ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

**Istomin A.L., Krivov M.V.**

## **DEVELOPMENT OF A SOFTWARE AND HARDWARE COMPLEX FOR THE DESIGN OF CHEMICAL AND TECHNOLOGICAL SYSTEMS**

**Аннотация.** Рассматриваются задачи построения программного комплекса автоматизированного проектирования математических моделей сложных химико-технологических процессов.

**Ключевые слова:** моделирование ХТС, разработка программного обеспечения.

**Abstract.** The problems of constructing a software package for computer-aided design of mathematical models of complex chemical and technological processes are considered.

**Keywords:** modeling of chemical and technological systems, software development.

Проектирование эффективных, в том числе оптимальных химико-технологических систем (ХТС) представляет собой сложную задачу, в результате решения которой определяются технологическая топология процесса, конструктивные параметры аппаратов, составляющих технологическую схему и значения технологических переменных ХТС, оптимально осуществляющей с точки зрения выбранного критерия оптимальности преобразования заданных потоков сырья (вектор входных переменных ХТС) в заданные потоки химических продуктов (вектор выходных переменных ХТС).

Оценка вариантов технологической топологии сложной ХТС экспериментальными методами без использования математических методов расчета ХТС может привести к грубым ошибкам. Это обусловлено тем, что сравнение вариантов структуры ХТС для условий «нормальной» эксплуатации в узком диапазоне исходных данных не дает объективно оценить эффективность процесса в широких диапазонах варьирования конструктивных параметров и технологических переменных ХТС. Проектирование ХТС силами проектных организаций характеризуется большими сроками выполнения работ, высокой стоимостью проектных работ, большой трудоемкостью проектно-конструкторских разработок в химической промышленности.

Эффективное решение указанной задачи возможно лишь с использованием научных, инженерно-технических и технико-экономических решений и ав-

томатизированной системы проектирования, построенной на базе математических моделей элементов ХТС и связей между ними, методов оптимизации нахождения экстремальных значений показателей эффективности подсистем и ХТС в целом.

Метод математического моделирования позволяет провести расчет технологических переменных для каждого аппарата, проверить полученные результаты на основе комплексного моделирования всей ХТС для заданных потоков сырья, осуществить сравнительную оценку различных топологических схем осуществления технологического процесса, конструктивных параметров и технологических переменных. Методы оптимизации позволяют найти такую реализацию химико-технологического процесса, при которой для заданных ограничений на значения входных и выходных переменных показатели эффективности процесса достигают максимума или минимума в зависимости от постановки задачи.

Современные автоматизированные системы проектирования ХТС должны предоставлять пользователю на выбор следующие конкретные задачи проектирования ХТС:

1. Для заданного химического синтеза целевого продукта из данных исходных веществ, заданных значений входных технологических потоков и заданной технологической топологии ХТС из заданного набора аппаратов с заданными конструктивными параметрами элементов, определять значения выходных потоков как для аппаратов, составляющих схему, так и ХТС в целом.

2. Для заданных топологии ХТС и значений входных технологических потоков определять оптимальные значения конструктивных параметров аппаратов, составляющих схему ХТС и обеспечивающих заданные значения выходных потоков.

3. При заданных свойствах и типах конечного множества элементов ХТС, обеспечивающих альтернативные способы осуществления химико-технологического процесса, определять топологическую структуру ХТС, при которой показатель эффективности ХТС будет оптимальным.

4. При заданном множестве альтернативных вариантов технологической топологии ХТС, обеспечивающих выполнение требуемой цели функционирования системы, определять наилучшую технологическую топологию, технологические переменные и конструктивные параметры аппаратов и элементов, которые обеспечивают оптимальное значение показателя эффективности ХТС.

5. При заданной технологической топологии ХТС, заданных конструктивных параметрах элементов и аппаратов, значений технологических переменных осуществлять коррекцию технологической топологии, устанавливать новые значения конструктивных параметров и значений технологических переменных, чтобы обеспечить выполнение требуемой цели функционирования процесса и оптимума ХТС в целом.

Решение этих задач предусматривает широкое применение принципов математического моделирования и разнообразных методов оптимизации как отдельных химико-технологических процессов, так и сложных ХТС.

Построение автоматизированной системы проектирования ХТС, позволяющей решить перечисленные задачи, представляет собой сложную научную проблему. Сложность решения этих задач связана с трудностью формализованного описания ряда технологических процессов, модели типовых аппаратов не всегда позволяют получить адекватную математическую модель системы в целом. Для описания отдельных процессов требуется проведение эксперимента для последующей идентификации параметров модели. Другой проблемой является отсутствие универсальных методов оптимизации пригодных для решения экстремальных задач. Эффективные методы разработаны лишь для линейных систем, решаемых симплексным методом линейного программирования, тогда как для ХТС характерны нелинейность, высокая размерность решаемых задач, для которых до сих пор не разработаны эффективные и устойчивые методы оптимизации. Кроме того, нахождение оптимального значения показателя функционирования ХТС в целом требует многократного согласования локальных оптимальных решений, полученных для отдельных подсистем и глобального оптимума системы.

В данной работе предлагается разработка программно-технического комплекса (ПТК) для компьютерного моделирования химико-технологических систем, являющегося подсистемой будущей автоматизированной системы проектирования ХТС.

Научно-методической основой для разрабатываемого ПТК должен стать эвристический подход, широко используемых проектировщиками химико-технологических систем в сочетании с принципами математического моделирования.

Эвристический подход заключается в том, что проектировщик-технолог на основе научно-технических знаний и практического опыта интуитивно выбирает некоторые, с его точки зрения, рациональные варианты решения какой-либо задачи без полного перебора всех возможных альтернативных вариантов решения поставленной задачи, начиная от выбора вариантов топологии ХТС, аппаратов системы из заданного подмножества элементов ХТС, их конструктивных параметров до интерпретации полученных в результате моделирования и расчета значений технологических переменных и локальных и глобальных показателей эффективности.

Процесс синтеза может повторяться многократно, до тех пор, пока не будет синтезирована ХТС, превосходящая наилучшую из полученных ранее.

Расчет технологических переменных и показателей эффективности проводится по математическим моделям, включенным в программно-технический комплекс.

Разрабатываемый ПТК позволяет провести компьютерное моделирование химико-технологических процессов и производства, с учетом взаимодействия аппаратов; показать особенности протекания процессов в отдельных аппаратах и производства в целом, определить материальные и тепловые балансы для аппаратов и производства в целом для заданных проектировщиком исходных данных.

В состав разрабатываемого ПТК должны входить:

1) компьютерная программа для графического построения и отображения топологии ХТС, позволяющая из заданного набора аппаратов (модулей) составить технологическую схему исследуемого химико-технологического процесса или производства для последующего решения комплекса задач по его идентификации и моделированию;

2) компьютерная программа для идентификации параметров математических моделей аппаратов и производства в целом, позволяющая, с учетом заданной топологической схемой взаимодействия аппаратов, на основе расчетов физико-химических свойств веществ и свойств многокомпонентных смесей, полученных на основе данных из фактографической базы данных физико-химических свойств индивидуальных веществ, идентифицировать коэффициенты и параметры математических моделей аппаратов и производства в целом, адекватно описывающих химико-технологический процесс и ХТС в целом;

3) компьютерная программа для моделирования отдельных химико-технологических процессов и ХТС в целом, представляющая собой симулятор химико-технологического процесса или ХТС, позволяющая рассчитывать выходные значения технологических переменных для аппаратов и ХТС в целом в широких диапазонах входных и управляющих переменных, а также конструктивных параметров аппаратов, входящих в технологическую схему.

В ПТК ХТС изображается в виде технологической схемы производства. Видимая часть этой схемы является набором аппаратов (единиц оборудования), связанных между собой потоками, и представляет собой определенного вида принципиальную схему химического производства. Для отображения типовых аппаратов химической технологии используется библиотека стандартных пиктограмм, с помощью которых выполняется построение технологической схемы. Для каждого аппарата задаются конструктивные параметры (размеры и прочие характеристики). Аппараты на графической схеме связываются направленными линиями (потоками). Информация о входных потоках включается в число исходных данных для расчета аппаратов, а в выходных потоках фиксируются некоторые результаты расчетов аппаратов. В тех случаях, когда в технологической схеме имеют место рециклы (обратные потоки) ПТК самостоятельно определяет значения обратных потоков.

После задания топологии ХТС, конструктивных параметров аппаратов и значений входных потоков ПТК решает задачу идентификации (определения)

параметров математических моделей аппаратов и ХТС в целом. Идентификация параметров моделей включает в себя расчет физико-химических свойств потоков на основе фактографических данных о свойствах индивидуальных веществ из соответствующих баз данных, составляющих неотъемлемую часть ПТК. При отсутствии физико-химических коэффициентов или констант для расчетов в имеющихся базах данных, ПТК должен определять их по вводимым в программу экспериментальным данным.

Программно-технический комплекс для компьютерного моделирования ХТС должен обеспечивать следующий комплекс задач:

- расчет отдельных аппаратов;
- расчет всей ХТС, в том числе с рециклами;
- расчет установившегося состояния ХТС;
- расчет динамических режимов ХТС;
- расчет материальных и тепловых балансов аппаратов и ХТС;
- расчет значений критериев эффективности химико-технологического процесса для заданного варианта ХТС.

Результаты расчетов и компьютерного моделирования представляются в виде:

- диаграммы процесса или производства. Под диаграммой процесса понимается изображение принципиальной схемы химико-технологического процесса или ХТС с некоторыми рассчитанными значениями свойств и показателей потоков и аппаратов;
- отдельных таблиц или графиков для каждого аппарата, группы аппаратов;
- отдельных таблиц или графиков для каждого потока, группы потоков;
- комплексного отчета, генерируемого пользователем.

## **ЛИТЕРАТУРА**

1. Кафаров В.В., Мешалкин В.П., Перов В.Л. Математические основы автоматизированного проектирования химических производств. – М.: Химия, 1979. – 320 с.
2. Гартман Т.Н., Клушин Д.В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов. – М.: ИКЦ «Академкнига», 2008. – 416 с.