

УДК 66.013.512

**УНИФИЦИРОВАННОЕ КОНФИГУРИРОВАНИЕ ХИМИКО-
ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СХЕМ**

Концевой С.А., Годзевич В.И.

УНІФІКОВАНЕ КОНФІГУРУВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СХЕМ

Концевой С.А., Годзевич В.І.

UNIFIED CONFIGURATION OF CHEMICAL ENGINEERING SCHEMES

Kontsevoi S.A., Godzevich V.I.

Национальный технический университет Украины
«Киевский политехнический институт»
serkon157@ukr.net

Описан способ конфигурирования химико-технологических схем (ХТС), при котором полученный результат не зависит от исполнителя, использующего предложенное соглашение на перевод текстового или графического не унифицированного представления схемы в унифицированное. Графические программные средства (редактор yEd) в сочетании с математическими программами (SciLab), использующими XML файлы для обмена данными, позволят рассчитывать ХТС в зависимости от её конфигурации.

Ключевые слова: конфигурация схем, унифицированное кодирование, текстовые форматы, визуализация схем, XML, GraphML

Описано спосіб конфігурування хіміко-технологічних схем (ХТС), при якому отриманий результат не залежить від виконавця, який використовує запропоновану угоду на переклад текстового або графічного не уніфікованого представлення схеми в уніфіковане. Графічні програмні засоби (редактор yEd) у поєднанні з математичними програмами (SciLab), які використовують XML файли для обміну даними, дозволять розраховувати ХТС залежно від її конфігурації.

Ключові слова: конфігурація схем, уніфіковане кодування, текстові формати, візуалізація схем, XML, GraphML

A method for configuration of chemical engineering schemes (CES) is offered. In this case, the result is independent of the developer and uses the proposed agreement on the translation of a text or a graphic representation of non-unified into a unified scheme. Graphics software (Editor yEd) and math program (SciLab), using XML files for data exchange, will calculate CES, depending on its configuration.

Keywords: configuration of schemes, unified coding, text formats, visualization of schemes, XML, GraphML

Введение

В настоящее время инженеру, который занимается разработкой и анализом химико-технологических схем (ХТС) необходимо иметь возможность создавать и

обмениваться базами данных разрабатываемых схем, включающими как их графическое представление, так и расчётные результаты. Однако на данный момент большинство таких схем существуют в графическом формате чертёжных программ (AutoCad), который не интегрирован или слабо интегрирован (посредством VBA) с выполнением расчётов ХТС. Специализированные коммерческие системы предоставляют такую возможность на основе закрытых форматов, но чаще всего не предназначены для компьютерного синтеза на основе неграфического описания технологических схем.

Постановка проблемы

По нашему мнению, для эффективного обмена информацией между разработчиками ХТС (как в открытых, так и коммерческих системах) необходимо использование специализированных открытых компьютерных форматов. При этом схема в таком формате должна быть объективно представляемой в независимости от стиля и технического вкуса разработчика, то есть быть унифицированной. Другими словами, схема, выполненная на основе текстового описания или неунифицированного чертежа разными людьми, будет выглядеть одинаково, а сгенерированные компьютерные описания будут также идентичными. Такая идентичность не только улучшит взаимопонимание между разработчиками, но и позволит вести базы данных по возможным конфигурациям ХТС.

Анализ исследований и публикаций

В современных программах всё шире используются унифицированные способы представления различной информации (графической, текстовой, численной) в формате XML и производных от него (GraphML). Однако в случае ХТС отсутствует унифицированный способ их представления, прежде всего в их конфигурационном аспекте: исходя из текстового описания технологических стадий и их последовательности, включая рециклы и байпасы, разные специалисты нарисуют разные схемы, реализующие одно и то же описание. В контексте кодирования таких схем в XML формате будут получены не идентичные файлы, и чем сложнее схема, тем больше будет возможных вариантов текстового описания. Таким образом, в программах, использующих XML для описания схемы расчёта (например, Xcos SciLab), параметры ХТС будут рассчитываться многократно с одним и тем же результатом. Ещё существенней проблема отсутствия единого представления ХТС при разработке экспертных программ синтеза технологических схем. Без единого подхода в описании схемы программа не сможет различать разные варианты описания одной схемы от действительно разных схем, реализующих одинаковую задачу.

Общепринятым правилом современных расчетов, в том числе и расчетов химико-технологических производств, есть «утаивание» вычислительных процедур через предоставление к услугам пользователя графического интерфейса. Также универсальные программные комплексы (Hysys, ChemCAD и т.п.) для расчета химико-технологических систем не предоставляют информацию о способе сохранения структуры ХТС. Такая закрытость, очевидно, порождает ряд организационных и технических проблем.

После исследования ряда публикаций были выявлены инициативы, направленные на унификацию обмена и представление топологии химико-

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ТА БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ

технологических процессов. В частности, XMLPlant [1], где был использован XML. XML документ состоит из текстовых знаков, и пригоден к чтению человеком и компьютерной обработке для хранения структуры, и CAPEOpen [2] – стандарт обмена данными между программами химико-технологического моделирования. По ряду причин эти инициативы не приобрели фактического признания среди производителей программных комплексов. На рынке есть ряд программных продуктов, которые позволяют рассчитать потоки ХТС, но они жестко ограничивают все возможности по обмену данными.

Унификация представления ХТС

Нами предлагается унифицированный способ черчения ХТС (рис. 1), на основе которого можно создавать как табличные (табл. 1), так и кодированные текстовые описания технологических схем. Далее полученные кодировки переводятся в XML формат или напрямую используются в программах на языках общего или специального назначения.

Таблица 1

Описание ХТС в табличном виде

	А	В	С	Д
1	Исходная вода	1 ступень ОО	2 ступень ОО	Обессол. вода
2	Рецикл концентрата 1 ст.	Концентрат 1		
3	Рецикл концентрата 2 ст.		Концентрат 2	
4	Отходы	Стоки 1 ст.	Стоки 2 ст.	

В приведённом примере 2-х ступенчатой обратноосмотической (ОО) установки, следует отметить возможность простой текстовой кодировки линий с оборудованием (прописные буквы) и без него (строчные), а рецикл описывается обратной (по алфавиту) последовательностью букв:

1:aBCd;2:ba;3:ca;4:b2c3.

В предлагаемом способе верхняя горизонтальная технологическая линия (уровень 1) представляет собой основной поток (от исходных веществ до основного продукта), выбор которого может определяться из нескольких критериев: производительности, числа аппаратов (если линия с максимальным расходом не очевидна), функциональности (в процессах очистки воды). Выбор критерия «основности» заранее оговаривается. Последовательность следующих уровней определяется очерёдность ответвления от основной линии, при этом линии с оборудованием идут раньше (выше), чем без него (рециклы и байпасы).

Данный способ представления ХТС не всегда эффективно использует пространство чертёжного листа, но позволяет получить одинаковые чертежи и кодировку на их основе, выполненные специалистами на основе текстового описания или неунифицированной схемы. Кроме этого, улучшается формальный контроль схемы по числу уровней для данной технологии и проверка по текстовой кодировке, что существенно в преподавании и при проектировании ответственных технологических участков.

Конфигурирование ХТС на основе XML

Рассмотрим программные средства для создания унифицированного представления ХТС с возможностью последующего использования для анализа (расчётов) и выбора оптимальной конфигурации на основе выполненных расчётов.

Для реализации нашей идеи предлагается использовать редактор уEd. Данный редактор хорошо зарекомендовал себя на всех популярных платформах и имеет алгоритмы для автоматической визуализации структуры произвольного графа. Также этот редактор сохраняет информацию в формате GraphML (на основе XML), что позволяет в дальнейшем провести расчет схемы с использованием информации об ее конфигурации.

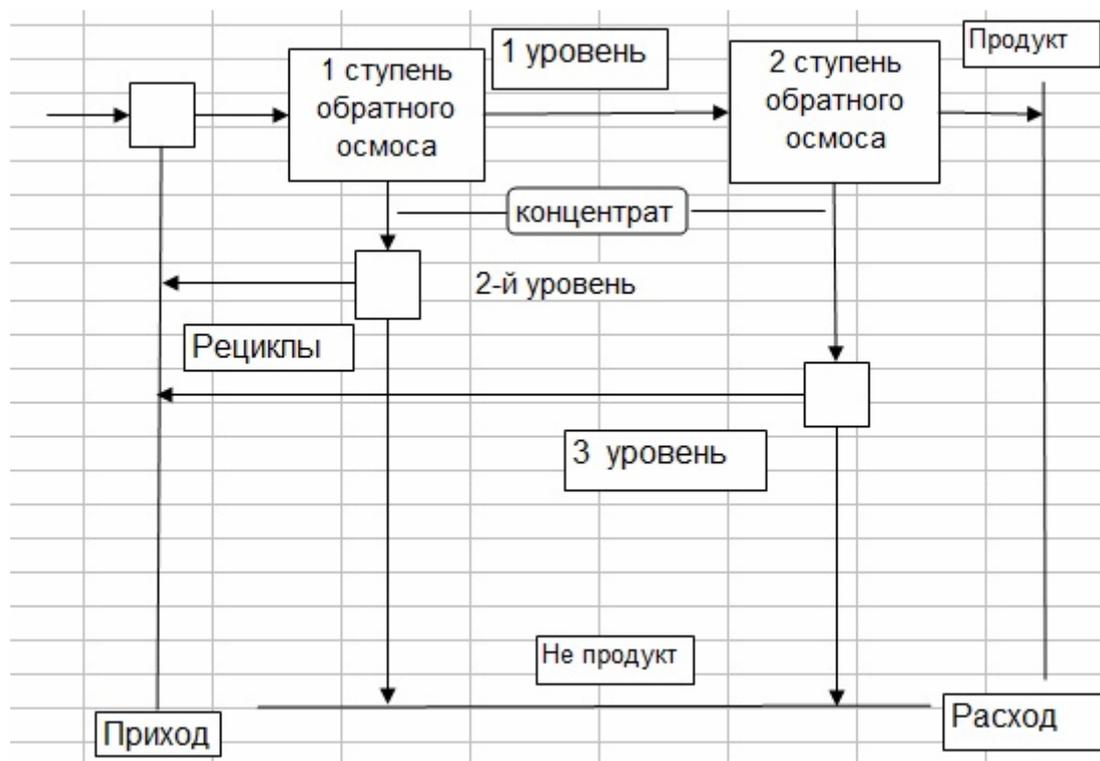


Рис. 1. Схема двухступенчатой ОО установки с рециклом части концентрата (редактор Excel)

Для примера разработанной процедуры покажем созданный в данном редакторе вариант схемы ОО установки (рис. 2).

Кроме топологии схемы водопотребления, примененный инструмент дает возможность задать параметры аппаратов и потоков, которые будут сохранены вместе с конфигурацией указанной схемы (в файле XML). В представленном примере такими параметрами избраны расход и состав входных потоков для 1-й и 2-й стадии обработки воды.

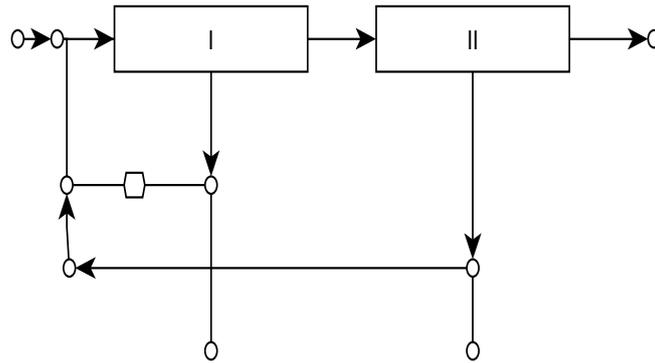


Рис.2. Схема двухступенчатой ОО установки с рециклом части концентрата (редактор yEd)

В силу ограниченности места приведем сокращенную запись схемы - фрагмент XML-файла, который описывает одно из ребер графа:

```
<edge id="e0" source="n0" target="n2">
<data key="d10">
  <y:ArcEdge>
    <y:Path sx="0.0" sy="0.0" tx="0.0" ty="0.0">
      <y:Point x="85.0" y="112.0"/>
    </y:Path>
    <y:LineStyle color="#000000" type="line" width="1.0"/>
    <y:Arrows source="none" target="standard"/>
    <y:Arc height="0.0" ratio="0.0" type="fixedRatio"/>
  </y:ArcEdge>
</data>
</edge>
```

В приведённом фрагменте данные топологии выделены жирным начертанием, а данные визуализации – курсивом. Анализируя весь листинг видно, что данные топологии и визуализации частично перемешаны. Это не существенно при дальнейшем программном расчёте схемы, поскольку самая структура формата XML спроектирована так, что позволяет выбрать лишь те данные, которые нужны для конкретного применения.

Для автоматического получения уникального индекса, который будет идентифицировать схему среди других, может быть использована технология XSLT. XSLT (eXtensible Stylesheet Language Transformations) – язык преобразования XML-документов. Спецификация XSLT входит в состав XSL и является рекомендацией W3C.

Описание на основе форматов графов

Представленный выше подход к кодированию ХТС имеет недостаток – избыточную информацию для специалиста в предметной области. С другой стороны, представление на основе таблиц не рационально используют пространство листа при черчении.

Используемые в настоящее время текстовые форматы для кодирования графов лишены первого недостатка, а специализированные программы (бесплатные GraphViz

и уEd) имеют разнообразные настройки для отображения заданной конфигурации, что позволяет оптимизировать пространство листа для отображения схемы, что преодолевает минусы табличного представления.

Из форматов графов следует отметить два TGF (Trivial Graph Format) и DOT (расширение .gv или .dot). Формат DOT (GraphViz) прямо не поддерживается в программе уEd, но существуют конверторы DOT в GraphML, с которым работает уEd.

Для представления схемы одноступенчатой ОО установки в DOT-формате используем явное представление смесителя и разделителя в ориентированном графе (неориентированный — graph):

```
digraph osmos1 {  
  «смеситель» -> «мембрана» -> «бак пермеата»;  
  «мембрана» -> «разделитель» -> «смеситель»; // рецикл концентрата  
  «разделитель» -> «бак стоков»;  
}
```

Следует отметить, что последовательность описаний связей в графе является не существенной, т.е. при размещении строки с рециклом концентрата в третьей линии, а не во второй, граф будет отображаться идентичным образом при выборе конкретного стиля отображения. Однако, текстовые представления двух вариантов (после преобразования текстового файла в строку) будут отличаться при использовании компьютерных функций сравнения строк. Следовательно, предложенная унификация представления ХТС (последовательность уровней схем) остаётся актуальной и для описанных форматов, поскольку обеспечивает однозначную идентификацию схем и в строчной кодировке.

Выводы

Таким образом, использование предлагаемого подхода представляется полезным для синтеза, расчётов и анализа любых химико-технологических схем. Формат технологических схем на основе таблиц, форматов графов, XML (GraphML) и связанных с ними информационных технологий позволит надёжно верифицировать схемы и открывает доступ к их широкому взаимному обмену, в том числе и на коммерческой основе.

Дальнейшие расчёты с использованием данных о конфигурации схемы и её параметров могут реализовываться на языках общего назначения (Python, VBA), а также в специализированных математических программах (SciLab, MatLab).

Литература

1. *Valter James, Stahl David*. Technology for Interoperability [Текст]. / N.Y., Wiley, 2009. – 150 с.
2. *CAPE-OPEN Laboratories Network (CO-LaN)* [Электронный ресурс] / - Режим доступа: <http://colan.org/index-1.html>.