

ПРАКТИЧЕСКОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И СИСТЕМ

Холоднов В.А.

ГОУВПО Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет) (СПбГТИ (ТУ)), holodnow@yandex.ru

В докладе будут представлены практические материалы, изложенные в учебных пособиях, изданных кафедрой по математическому моделированию, оптимизации химико-технологических объектов и систем [1-10]. Учебные пособия имеют гриф УМО по университетскому политехническому образованию. Практические примеры моделирования химико-технологических объектов и систем с помощью Mathcad изложены в [1, 4, 5, 7, 8].

Здесь рассмотрены вопросы моделирования химико-технологических и биохимических объектов управления, некоторых химико-технологических процессов и химических реакторов, изложено моделирование химико-технологических процессов для решения экологических проблем.

В учебном пособии [9] предложен метод интервального оценивания параметров математического описания для сложных моделей химико-технологических процессов и систем, что особенно важно для оптимизации химико-технологических систем в условиях неопределенности информации.

Вопросы использования компьютерных технологий при исследовании структуры потоков методом математического моделирования изложены в [10].

Здесь подробно рассмотрен алгоритм расчета коэффициента продольного перемешивания и значения критерия Пекле на основе решения уравнений математического описания дифференциальной функции распределения времени пребывания. Также приводятся компьютерные технологии моделирования процесса изменения концентрации индикатора в аппарате при импульсном возмущении на основе ячеечной модели, моделирование процесса изменения концентрации индикатора в аппарате при импульсном возмущении на основе аналитического решения.

Вопросы оптимизации химико-технологических процессов и систем с использованием Mathcad и Excel изложены в [2, 3]. Особое внимание здесь уделено вопросам оптимизации в условиях неопределенности исходной информации, целочисленной оптимизации, дискретной оптимизации. Приведены многочисленные практические примеры оптимизации.

Компьютерные технологии реализации методов многокритериальной оптимизации обсуждаются в [3]. Рассматриваются традиционные методы решения задач многоцелевой оптимизации: метод главной компоненты, принцип последовательной «уступки», метод комплексного критерия, метод Гермейера метод справедливого компромисса, метод условного центра масс.

Приводятся практические примеры оптимизации процесса кристаллизации полугидрата сульфат кальция, технико-экономическая многоцелевая оптимизация систем на основе маргинальных решений, разработка нового полимерного материала, исследование процесса конверсии нитрата кальция и фосфорной кислоты. Рассматриваются вопросы решение задач многоцелевой оптимизации в маркетинговых исследованиях.

Как известно при моделировании ХТС наряду с моделями отдельных аппаратов используют модель всей системы. Поэтому в [6] приводятся известные методы и программы для моделирования ХТС с материальными и тепловыми рециклами, что характерно для химических производств. Здесь показано использование лицензионных программных продуктов для моделирования статических режимов ХТС.

В докладе будут приведены и обсуждены результаты моделирования и оптимизации с помощью ASPEN PLUS следующих задач: каталитическая гидратация этилена, оптимизация

выпарной установки, получение хлористого этила, синтез оптимальных систем теплообмена, расчет различных типов химических реакторов, моделирование различных процессов ректификации многокомпонентных смесей, процесс синтез-газа, фрагмент ХТС окисления SO_2 в SO_3 .

1. Холоднов В.А., Дьяконов В.П., Иванова Е.Н., Кирьянова Л.С. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов: Практическое руководство Печ. СПб. АНО НПО «Профессионал», 2003. – 480 с.
2. Холоднов В.А., Лебедева М.Ю. Системный анализ и принятие решений. Решение задач оптимизации химико-технологических систем в среде Mathcad и Excel. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2005. – 220 с.
3. Холоднов В.А., Лебедева М.Ю., Пунин А.Е., Хартманн К. Системный анализ и принятие решений. Компьютерные технологии решения задач многоцелевой оптимизации систем. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2006. – 152 с.
4. В.А.Холоднов, Ас. М.Гумеров, В.М.Емельянов и др. Системный анализ и принятие решений. Математическое моделирование и оптимизация объектов химической технологии. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2006. – 340с.
5. В.А.Холоднов, В.Решетиловский и др. Системный анализ и принятие решений. Компьютерное моделирование и оптимизация объектов химической технологии в Mathcad и Excel. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2007. – 434с.
6. В.А.Холоднов, К.Хартманн и др. Системный анализ и принятие решений. Компьютерные технологии моделирования химико - технологических систем. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2007. – 160с.
7. В.М.Крылов, В.А.Холоднов. Теория и практика математического моделирования. Учебное пособие. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2007. – 178с.
8. Холоднов В.А., Кирьянова Л.С., Сидоров В.А. Системный анализ и принятие решений. Компьютерное моделирование объектов химической технологии в Mathcad. ПРАКТИКУМ к лабораторным работам по учебным дисциплинам «Информатика» и «Системный анализ химических технологий»: учебное пособие. – СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2008. – 91 с.
9. Холоднов В.А. Компьютерные технологии точечного и интервального оценивания параметров парной линейной регрессии по методу наименьших квадратов. Учебное пособие / В.А.Холоднов, СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2008. – 78 с.
10. Холоднов В.А. Системный анализ и принятие решений. Математическое моделирование гидродинамической структуры однофазных потоков в химических реакторах. Учебное пособие / В.А. Холоднов, В.П. Решетиловский, Е.С. Боровинская, В.П. Андреева. СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2009. – 35 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗО-ЖИДКОСТНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА КАЛЬЦИНИРОВАННОЙ СОДЫ

Цейтлин М.А., Райко В.Ф.

Национальный технический университет «ХПИ», mzeit@mail.ru

Кальцинированная сода производится на заводах Украины по так называемому «аммиачному методу», известному также как метод Сольвэ. Он заключается в последовательном насыщении раствора поваренной соли аммиаком и диоксидом углерода. При этом в осадок выпадает малорастворимый в этой системе гидрокарбонат натрия, который отделяют и прокаливают (кальцинируют) с получением готового продукта.

Как видно из приведенного описания, основные процессы в производстве соды протекают в системе $\text{NH}_3 - \text{CO}_2 - \text{H}_2\text{O} - \text{NaCl}$. Сложность математического моделирования газо-жидкостных взаимодействий в этой системе обусловлена следующими ее особенностями: а) инертные носители отсутствуют, а вода является не только растворителем,