

Федеральное агентство по образованию  
Государственное образовательное учреждение  
высшего профессионального образования  
Ивановский государственный химико-технологический университет

С.В. Натареев

**СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ  
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ХИМИЧЕСКОЙ  
ТЕХНОЛОГИИ**

Учебное пособие

Иваново 2007

УДК 519.7

Натареев С.В. Системный анализ и математическое моделирование процессов химической технологии / С.В. Натареев; под ред. В.Н. Блиничева; Иван. гос. хим.–технол. ун–т: учебное пособие. - Иваново, 2007. 80 с. ISBN

В учебном пособии изложены основы системного подхода к исследованию химико-технологических систем. Рассмотрены математические модели химико-технологических процессов на различных уровнях иерархии явлений. Приведены примеры расчета основных процессов химической технологии с помощью пакета Mathcad 13.

Предназначено для студентов специальности “Машины и аппараты химических производств”.

Табл. 1. Ил. 26. Библиогр.: 8 назв.

Печатается по решению редакционно-издательского совета Ивановского государственного химико-технологического университета

Рецензенты: доктор технических наук Мизонов В.Е. (Ивановский государственный энергетический университет), кандидат технических наук Шомов П.А. (ООО “Научно-технический центр “Промышленная энергетика”).

ISBN

© ГОУВПО Ивановский государственный  
химико-технологический  
университет, 2007

## Оглавление

Введение	4
Глава 1. Системные закономерности в химической технологии	5
1.1. Химико-технологическая система и этапы её исследования	5
1.2. Классификация и свойства ХТС	7
1.3. Иерархия ХТС	9
1.4. Технологические операторы и типы связей между ними	10
1.5. Модели ХТС	13
1.6. Топологические исследования ХТС с помощью схемо-графических моделей	16
1.7. Представление структуры ХТС в виде графов и матриц	21
1.8. Синтез оптимальной структуры ХТС	26
Глава 2. Математическое моделирование химико-технологических систем	28
2.1. Основные понятия и определения	28
2.2. Основные типы математических моделей	28
2.3. Составление математического описания и выбор метода его решения	29
2.4. Параметрическая идентификация и проверка адекватности математической модели	33
Глава 3. Составные части математической модели химико-технологического процесса	44
3.1. Химическое и фазовые равновесия	44
3.2. Материальный баланс	51
3.3. Тепловой баланс	55
3.4. Гидродинамика структуры потоков	57
3.5. Кинетика химико-технологических процессов	63
3.5.1. Химическая кинетика	63
3.5.2. Кинетика теплообменных процессов	68
3.5.3. Кинетика массообменных процессов	75
Список литературы	80

## Введение

Перспективы развития химической технологии определяются необходимостью создания и внедрения интенсивных химико-технологических процессов, высокопроизводительного оборудования и повышения эффективности существующих производств. Облегчить поиск решения этой сложной задачи помогает метод математического моделирования, базирующийся на стратегии системного анализа. Одним из центральных понятий системного анализа является понятие “системы”, которая представляет собой единство отношений и связей отдельных её частей и функционирует благодаря определенной структуре и большому числу взаимосвязанных и взаимодействующих друг с другом элементов. В зависимости от цели исследования в качестве химико-технологической системы могут приниматься химический завод, цех, отдельная промышленная установка, единичный реактор и протекающий в нем процесс. Построение и изучение математической модели ХТС, конечно, является непростой задачей, но по сравнению с натурным моделированием гораздо дешевле и быстрее.

Учебное пособие предназначено в помощь студентам для изучения основ системного подхода для решения задач моделирования, расчета и проектирования процессов и аппаратов химической технологии.

# Глава 1. Системные закономерности в химической технологии

## 1.1. Химико-технологическая система и этапы её исследования

Процессы химической технологии весьма многообразны. Различают механические, гидромеханические, тепловые, массообменные и химические процессы. Многообразие химико-технологических процессов обуславливает разнообразие конструкций аппаратов, в которых протекают эти процессы. Совокупность взаимосвязанных процессов и аппаратов химической технологии, функционирование которых осуществляется с целью химической переработки природных материалов в продукты потребления и промежуточные продукты образует химико-технологическую систему (ХТС).

Любая ХТС имеет определенную технологическую структуру с заданными параметрами, функционирование которой оценивается с помощью входных и выходных переменных (рис. 1.1).

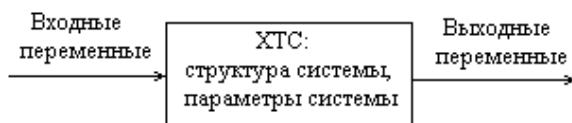


Рис. 1.1. Схема ХТС

Основными частями любой ХТС являются элемент и подсистема.

Элементом системы называется самостоятельная, условно неделимая часть системы, обладающая определенным качеством.

При анализе любого химического производства в качестве элемента могут рассматриваться отдельные аппараты: реактор, адсорбер, теплообменник и т.д.

Подсистемой называется самостоятельно функционирующая часть системы, образованная из элементов, имеющих аналогичные свойства.

Понятия “система”, “подсистема” и “элемент” – относительны, т.к. одна система может быть элементом другой

системы более крупного масштаба, а отдельный элемент какой-либо системы может быть разделен на составные части.

Связь между элементами системы осуществляется с помощью потоков, характеризующих перенос вещества, теплоты и энергии от элемента к элементу. В каждом элементе ХТС осуществляется качественное и количественное преобразование входящих потоков в результате протекания в них определенного химико-технологического процесса.

Параметры ХТС – это физико-химические величины, характеризующие какое-либо свойство процесса, явления, системы.

Различают конструктивные и технологические параметры ХТС. К конструктивным параметрам ХТС относятся геометрические характеристики элементов системы: диаметр, объем и т.п. Технологические параметры ХТС – это физико-химические величины, характеризующие технологический процесс.

Входные переменные ХТС – это параметры физико-химического воздействия внешней среды на ХТС.

Выходные переменные ХТС – это параметры выходных технологических потоков из системы.

Разработка, проектирование и управление ХТС базируется на стратегии системного анализа.

Системный анализ ХТС – это метод научного исследования процессов химической технологии путем представления данного процесса как сложной иерархической системы с последующим проведением качественного анализа её структуры, создания на этой основе математической модели и изучения ХТС с помощью разработанной модели с целью нахождения оптимальных параметров и характеристик функционирования системы.

Повышение эффективности функционирования ХТС связано с выполнением операций анализа, синтеза и оптимизации.

Анализ ХТС состоит в изучении свойств и показателей качества функционирования системы в зависимости от конструктивных и технологических параметров, технологических режимов элементов, а также структуры технологических связей между подсистемами и элементами.

Синтез ХТС состоит в изучении системы путем объединения элементов и структуры технологических связей между ними в единое целое с целью создания функционирующей ХТС с требуемыми параметрами.

При синтезе ХТС создаются, рассчитываются и оптимизируются альтернативные варианты ХТС, из которых выбирается наилучший. Синтез тесно связан с поиском оптимальной ХТС.

Оптимизация ХТС состоит в нахождении наилучшего варианта функционирования системы при заданных условиях и ограничениях.

Стратегия системного исследования ХТС состоит из четырех основных этапов:

- 1) качественный анализ структуры ХТС;
- 2) формализация сформулированных качественных представлений об элементах и связях между ними;
- 3) идентификация параметров математической модели и установление степени соответствия результатов наблюдений, полученных на реальном объекте, с теоретическими следствиями модели;
- 4) реализация математического описания на ЭВМ в виде комплекса прикладных программ.

## 1.2. Классификация и свойства ХТС

По внутреннему строению ХТС различают на два типа: однородные и неоднородные.

Однородные ХТС состоят из одного вида элементов, в которых протекают одинаковые химико–технологические процессы. Например, к таким системам может быть отнесена система химических реакторов, система теплообменных аппаратов и др.

Неоднородные ХТС состоят из разного вида элементов, в которых протекают различные химико–технологические процессы. К неоднородным ХТС может быть отнесена совокупность машин и аппаратов для подготовки сырья, технологическая установка для получения определенного продукта и др.

По способу функционирования ХТС различают следующие основные классы систем: непрерывные,

непрерывно-циклические, непрерывно-периодические, периодические и индивидуальные.

Непрерывные ХТС характеризуются стационарным неизменным во времени функционированием.

Непрерывно-циклические ХТС характеризуются стационарным неизменным во времени функционированием с циклическим изменением во времени входных переменных.

Непрерывно-периодические ХТС характеризуются стационарным неизменным во времени функционированием с периодически изменяющимися во времени входными переменными.

Периодические ХТС характеризуются периодическим законом изменения во времени входных переменных и переменных состояния ХТС.

Индивидуальные ХТС – это способ функционирования системы, зависящий от периода времени, вида используемого сырья и других факторов.

К основным свойствам ХТС относятся: надежность, чувствительность, управляемость, помехозащищенность, устойчивость, эмерджентность и др.

Надежность – это свойство системы сохранять заданные функции и выпускать требуемую продукцию в определенный период времени. Надежность ХТС характеризуется частотой отказов отдельных элементов системы.

Чувствительность – это свойство системы изменять технологические режимы функционирования под влиянием изменения собственных параметров системы и внешних возмущающих воздействий.

Управляемость – это свойство системы достигать желаемой цели при тех ограниченных ресурсах управления, которые имеются в реальных условиях эксплуатации.

Помехозащищенность – свойство системы эффективно функционировать в условиях действия внутренних и внешних помех.

Устойчивость – это способность системы возвращаться в первоначальное состояние после прекращения возмущающего воздействия.

Эмерджентность – это способность системы приобретать новые свойства, которые отличаются от свойств отдельных элементов, образующих эту систему.



### 1.3. Иерархия ХТС

Анализ структуры ХТС удобно проводить на основе иерархического принципа. Его суть состоит в том, что сложная система рассматривается как совокупность элементов, которые взаимосвязаны, взаимодействуют между собой и внешней средой. Элементы, находящиеся на более высокой ступени иерархии, выполняют все функции элементов системы, принадлежащих более низкой ступени иерархии.

Рассмотрим химическое производство как сложную ХТС, имеющую три уровня иерархии.

Первую, низшую ступень иерархической структуры составляют типовые процессы химической технологии (химические, тепловые, диффузионные, гидромеханические, механические) в определенном аппаратном оформлении.

Вторую ступень иерархии образуют производственные цеха, выполняющие определенные технологические процессы либо изготавливающие определенную продукцию, а также системы управления цехами.

Третью, высшую ступень образуют системы управления совокупностью цехов, организации производства, планирования запасов сырья и реализации готовых продуктов.

В качестве примера рассмотрим также один из возможных вариантов иерархической структуры химического процесса, протекающего в реакторе.

На низшем уровне иерархии, так называемом молекулярном уровне, рассматриваются межмолекулярные взаимодействия, законы химического и межфазовых равновесий, закономерности химических реакций и т.д.

Следующим является уровень одного элемента дисперсной фазы. Таким элементом может быть одно зерно адсорбента, катализатора, пузырек газа и т.д. На этом уровне рассматриваются закономерности тепло- и массопереноса между дисперсной и сплошной фазами.

На третьем уровне изучаются физико-химические процессы в малом слое или объеме аппарата, например в слое адсорбента, катализатора, насадки и т.д. При этом учитываются эффекты, связанные с характером движения подвижных фаз в малом слое аппарата.

Высшим уровнем является уровень аппарата в целом. Здесь рассматривается взаимодействие между различными рабочими зонами в аппарате, например зонами сорбции и десорбции, зонами нагревания и охлаждения.

Очевидно, что количество и качественный анализ уровней иерархической структуры химико–технологической системы может быть различным в зависимости от цели создаваемого объекта и исходной информации об этом объекте.

#### 1.4. Технологические операторы и типы связи между ними

Каждый элемент ХТС, характеризующий сущность физико-химического процесса, протекающего в элементе, изображается в виде типового технологического оператора. Технологические операторы различаются на основные и вспомогательные (рис. 1.2).

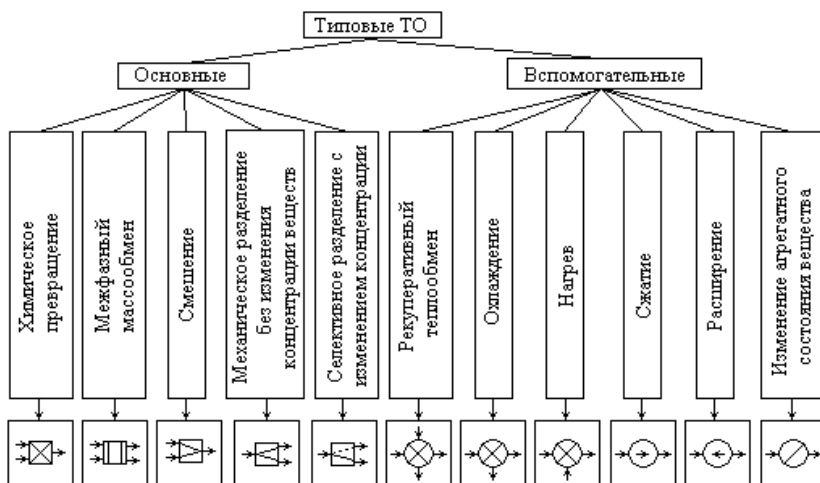


Рис. 1.2. Обозначения типовых технологических операторов

Основные технологические операторы отражают химические и физические превращения, происходящие в элементе ХТС.

Вспомогательные технологические операторы отражают энергетические и фазовые явления, сопровождающие