

УДК 519.673:620.9.97

А. В. Игнатъева*

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия

125480, Москва, ул. Героев Панфиловцев, д. 20, корп. 1

* e-mail: nasty2351@rambler.ru

РАЗРАБОТКА КОМПЬЮТЕРНЫХ МОДЕЛЕЙ ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ С ПРИМЕНЕНИЕМ СОВРЕМЕННЫХ КОМПЛЕКСОВ ПРОГРАММ – ПЕРСПЕКТИВНЫЙ ПУТЬ СОЗДАНИЯ РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ТЕХНОЛОГИЙ В ХИМИЧЕСКОЙ ПРОМЫШЛЕННОСТИ

С применением комплекса программ CHEMCAD разработан эффективный подход для построения компьютерных моделей химических производств, которые могут использоваться для создания ресурсосберегающих и экологически безопасных технологий. Этот подход реализован на примере построения компьютерной модели производства аммиака из природного газа. Разработанная модель применима для решения оптимизационных задач.

Ключевые слова: модель, модуль, производство, комплекс программ, ресурсосбережение.

Современные тенденции развития химической промышленности требуют разработок ресурсосберегающих, экономически выгодных, а также экологически безопасных технологических схем производств [1]. Чтобы решить первые две задачи стараются оптимизировать всю технологическую линию в целом, а для решения третьей задачи стремятся разрабатывать безотходные и малоотходные технологии. Важнейшим условием решения данных задач является моделирование и оптимизация химических производств, для чего необходимы модели их технологических схем, включающие большое число единиц оборудования, учитывающие, все рециклические материальные и тепловые потоки. В настоящее время существует эффективный инструмент разработки компьютерных моделей химических производств – современные комплексы проблемно-ориентированных программ, так называемые симуляторы химических производств, с применением которых возможно научно-обоснованное решение таких задач [2]. Аналитический обзор современных и доступных на отечественном рынке комплексов проблемно-ориентированных программ изложен в [3-4]. Применению комплекса программ CHEMCAD для расчёта химических производств посвящены работы [5-11].

В данной работе на примере разработки компьютерной модели технологической схемы получения аммиака из природного газа с комплекса программ CHEMCAD предлагаются и реализуются основные подходы к моделированию химических производств. Для расчёта технологической линии было использовано методическое обеспечение блочного компьютерного моделирования энерго- и ресурсоёмких ХТС, разработанное в [12]. Аммиак относится к числу важнейших продуктов химической промышленности, ежегодное его мировое производство достигает 150 млн. тонн. В основном используется для производства азотных удобрений, взрывчатых веществ и полимеров, азотной кислоты,

соды и других продуктов химической промышленности [13-18]. Созданная модель может быть применена для анализа различных вариантов технологических схем, а также определения оптимальных условий проведения химико-технологических процессов с учетом перечисленных выше требований.

Основными этапами создания компьютерной модели полной технологической схемы производства аммиака из природного газа, включающего три основных и одно вспомогательное отделения, являются:

1. Разработка и реализация моделей четырёх основных отделений производства.

Модель первого отделения парокислородной конверсии и получения синтез-газа включает 60 модулей аппаратов (единиц оборудования) и 115 потоков. Синтез-газ также используется для получения синтетического жидкого топлива, метанола и других органических соединений [19-22]. Это отделение содержит три основных узла: узел сероочистки, реакторный узел (узел получения синтез-газа), узел сепараторов (узел отделения воды от синтез-газа).

Процессы в физических аппаратах этого отделения, в основном, моделируются путем комбинации стандартных расчётных модулей моделирующей программы.

Расчетные модули (в дальнейшем просто модули) представляют собой реализованные в программном комплексе вычислительные алгоритмы, предназначенные для расчёта различных химико-технологических процессов [23-24].

Результаты моделирования (параметры выходного потока, направляющегося в отделение) указаны в таблице 1. В этой же таблице приведены экспериментальные данные.

Модель второго отделения окисления СО включает 4 модуля аппарата (единиц оборудования) и 7 потоков. В этом отделении СО окисляется в СО₂.

Таблица 1. Сравнение результатов рассчитанного выходного потока, отделения парокислородной конверсии, с экспериментальными данными

Свойство потока	Расчётные данные	Экспериментальные данные
Температура, °С	30	35
Давление, бар.	30	34.9
Общий объёмный расход, норм. м ³ /ч	430000	435800
Содержание компонента, об. %		
H₂	34.5	33.51
CO	6.54	7.18
CO₂	7.25	7.55
N₂	0.19	0.21
H₂O	50.62	51
CH₄	0.9	0.55

Модель третьего отделения абсорбции (абсорбции с химической реакцией) включает 4 модуля аппарата (единицы оборудования) и 9 потоков. В этом отделении происходит поглощение CO₂ раствором этаноламина.

Модель четвертого отделения синтеза аммиака включает 8 модулей аппаратов (единиц оборудования) и 14 потоков. В этом отделении получается аммиак.

2. Разработка и реализация модели крупнотоннажной, энерго- и ресурсоёмкой технологической схемы производства аммиака из природного газа.

При реализации полной модели производства аммиака учитываются внешние рециклические материальные и тепловые потоки, которые связывают между собой различные отделения производства.

3. Анализ параметрической чувствительности компьютерной модели полной технологической схемы производства аммиака.

С использованием компьютерной модели всего производства, построенной с применением комплекса программ CHEMCAD, возможно определяются влияние различных параметров на результаты расчёта и возможные ресурсы для технологической и экономической оптимизации.

Выводы

- С применением комплекса программ CHEMCAD построены и реализованы компьютерные модели четырёх отделений производства аммиака из природного газа;
- Проведено компьютерное моделирование полной технологической схемы производства аммиака, при котором учтены рециклические (обратные) материальные и тепловые потоки;
- Изучено влияние различных параметров на результаты расчёта и выявлены возможные ресурсы оптимизации.

Игнатъева Анастасия Вячеславовна, студентка-дипломница кафедры информатики и компьютерного проектирования РХТУ им. Д. И. Менделеева, Россия, Москва

Литература

15. Гартман Т. Н. Компьютерное моделирование энерго- и ресурсосберегающих химических производств // Программные продукты и системы. — 2002. — № 4. — С. 29-32.
16. Серафимов Л. А., Тимофеев В. С. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза. — М.: Высшая школа. — 2003. — 536 С.
17. Гартман Т. Н., Советин Ф. С. Аналитический обзор современных пакетов моделирующих программ для компьютерного моделирования химико-технологических систем // Успехи в химии и химической технологии. — 2012. — Т. 26. № 11 (140). — С. 117-120.
18. Островский Г. М., Волин Ю. М. Три этапа компьютерного моделирования химико-технологических систем // Теоретические основы химической технологии. — 2006. Т. 40, № 3. — С. 302-312.
19. Щеглова А.А. Реконструкция технологического узла нитрования крупнотоннажного производства нитробензола // Успехи в химии и химической технологии. — 2012. — Т. 26. № 11 (140). — С. 127-132.
20. Третьяков М. И. Оптимизация технологического узла газификации широкой фракции лёгких углеводородов // Успехи в химии и химической технологии. — 2012. — Т. 26. № 11 (140). — С. 120-125.
21. Проскуро Е. А. Оптимизация процесса ректификации в трёхколонной установке разделения метанола-вода. // Успехи в химии и химической технологии. — 2011. — Т. 25. № 13 (129). — С. 78-81.
22. Широков М. А. Модернизация узла гидрокрекинга и ректификации в производстве синтетического жидкого топлива из природного газа // Успехи в химии и химической технологии. — 2011. — Т. 25. № 13 (129). — С. 74-78.
23. Гартман Т. Н., Советин Ф. С. Применение пакетов программ CHEMCAD для моделирования процессов многокомпонентной ректификации в тарельчатых колоннах при получении синтетического жидкого топлива // Химическая техника. — 2010. — № 2. — С. 36-38.

24. Гартман Т. Н., Советин Ф. С. Компьютерное моделирование технологического узла ректификации производства метанола с применением пакетов программ CHEMCAD // Химическая техника. — 2010 — № 4. — С. 12-14.
25. Аленикова А.А., Проскуро Е.А., Сафонова В.Д. Разработка компьютерной модели четырёхколонной технологической схемы ректификации смеси ароматических углеводородов. // Успехи в химии и химической технологии. — 2014. — Т. 28. № 2 (151). — С. 31-33.
26. Советин Ф. С. Разработка и применение методического обеспечения блочного компьютерного моделирования энергоресурсоёмких химико-технологических систем с применением инструментальных комплексов программ. Дис..... канд. техн. наук. — М. 2011. — 190 с.
27. Шаталов К. И. Термодинамические характеристики образования $K_2[NiF_6](к)$, $(NO_2)_2[NiF_6](к)$, $(ClOF_2)_2[NiF_6](к)$ и $Ca[NiF_6](к)$ при 298,15 К. Дис..... канд. хим. наук. — М. 2011. — 80 с.
28. Шаталов К.И., Соловьев С.Н. Стандартная энтальпия образования $(NO_2)_2[NiF_6]$ (кр.) // Журнал физической химии. — 2011. — Т. 85. № 2. — С. 388-390.
29. Шаталов К.И., Соловьев С.Н. Стандартная энтальпия образования $K_2[NiF_6]$ (кр.) // Журнал физической химии. — 2009. — Т. 83. № 6. — С. 1193-1195.
30. Советин Ф. С., Гартман Т. Н. Применение комплекса программ CHEMCAD для разработки компьютерной модели технологического узла нитрования крупнотоннажного производства нитробензола // Химическая техника. — 2012. № 4. — С. 44-45.
31. Семенихин Я. В., Федосеев А. С. Использование модифицированного магниезиального связующего в композитных материалах // Успехи в химии и химической технологии. — 2008. — Т. 22. № 2 (82). — С. 66-68.
32. Мешкова А.А., Сафонова В.Д., Гартман Т.Н. Разработка процедур расчёта химико-технологических систем с учётом реакций диссоциации электролитов в неорганических системах // Успехи в химии и химической технологии. — 2014. — Т. 28. № 2 (151). — С. 24-27.
33. Басос А. Г., Проскуро Е. А., Сафонова В. Д. Разработка компьютерной модели технологической схемы получения синтез-газа окислительной конверсией метана. // Успехи в химии и химической технологии. — 2014. — Т. 28. № 2 (151). — С. 28-30.
34. Гартман Т. Н., Советин Ф. С., Новикова Д. К. Опыт применения программы CHEMCAD для моделирования реакторных процессов // Теоретические основы химической технологии. — 2009. — Т. 43, № 6. — С. 702-712.
35. Гартман Т. Н., Советин Ф. С., Новикова Д. К. Разработка компьютерной модели многостадийного производства метанола из природного газа // Химическая промышленность сегодня. — 2012. — № 3. — С. 45-53.
36. Гартман Т. Н. Синтез интегрированной химико-технологической получения синтетического жидкого топлива и метанола из природного газа с применением проблемно-ориентированного комплекса программ CHEMCAD / Гартман Т. Н., Советин Ф. С., Новикова Д. К., Сеннер С. А. // Химическая техника. — 2011. — № 9. — С. 41-44.
37. Гартман Т. Н., Клушин Д. В. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов. — М.: ИКЦ «Академкнига». — 2008. — 415 с.
38. Советин Ф. С., Гартман Т. Н. Логико-вычислительные процедуры разработки блочных компьютерных моделей реакторных и ректификационных процессов // Известия Тульского Государственного Университета. Технические науки. — 2011. Вып. 5. ч. 3. — С. 277-282.

*Ignatieva Anastasia Vyacheslavovna**

D.I. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

* e-mail: nasty2351@rambler.ru

THE DEVELOPMENT OF THE COMPUTER MODELS RESOURCES SAVING AND ECOLOGICALLY SAFE CHEMICAL PRODUCTIONS BY USING MODERN SIMULATORS

Abstract

By using of simulator CHEMCAD is developed the effective approach to build the full computer models of chemical productions with creation resources saving, as well as ecologically safe technologies. This approach is realized on an example of simulation of computer model of the production of ammonia from natural gas. This model can be used for the optimization of the technological line

Key words: model, module, production, simulator, resources saving.