

ПРИМЕНЕНИЕ ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ДИСЦИПЛИНЫ «КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ХИМИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВАХ»

Шибитова Н.В.¹, Шибитов Н.С.¹, Черикова К.В.¹

¹ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный технический университет», Волгоград, e-mail: natanik@vstu.ru

В статье приведена апробированная методика изучения и применения современных доступных программных средств типа QBASIC, MS EXCEL, MATHCAD и CHEMSEP при изучении дисциплины «Компьютерные технологии в химических производствах» в соответствии с подготовкой бакалавров по направлению 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии». В настоящее время для выполнения технологических расчетов оборудования нефтехимического комплекса (НХК), являющегося основным заказчиком специалистов по направлению 18.03.02, используются в основном пакеты программ HYSYS, PRO-II, CHEMCAD и др. Это программное обеспечение, позволяющее не только выполнять технологические расчеты, проводить моделирование, но и осуществлять оптимизацию как отдельных аппаратов, так и целых технологических линий с точки зрения энерго- и ресурсозатрат. Однако при выполнении расчетов существует формальный подход, и студенты не вдаются в сущность отдельных процессов, тем более в стадии процессов, а только заполняют требуемые спецификации аппаратов. В данной статье предложена концепция подготовки будущих специалистов на примере одного из важных, но энергозатратных процессов – ректификации. Показано, что при выполнении лабораторных работ по дисциплине «Компьютерные технологии в химических производствах» на базе программного обеспечения QBASIC, MS EXCEL, MATHCAD и CHEMSEP выделяются отдельные блоки (например, проанализировать влияние давления на положение равновесной линии, влияние флегмового числа на положение рабочих линий на x, y -диаграмме, а также на размеры колонны и энергозатраты). В дальнейшем, выполняя курсовые работы и выпускную работу бакалавра, студенты применяют соответствующее программное обеспечение. Приобретенные навыки впоследствии позволят не только освоить программные пакеты более высокого уровня, но и успешно применять полученные знания на производстве.

Ключевые слова: бинарная смесь, теоретические тарелки, флегмовое число, колонна, исследование, моделирование

THE USE OF THE SOFTWARE IN THE STUDY THE DISCIPLINE «COMPUTER TECHNOLOGY IN CHEMICAL PRODUCTION»

Shibitova N.V.¹, Shibitov N.S.¹, Cherikova K.V.¹

¹Federal State Budget Educational Establishment of Higher Education State «Volgograd state technical University», Volgograd, E-mail: natanik@vstu.ru

The article presents a proven methodology for the study and application of modern available software such as QBASIC, MS EXCEL, MATHCAD and CHEMSEP in the study of the discipline «Computer technologies in chemical industries» in accordance with the preparation of bachelors in the direction of 18.03.02 «Energy and resource-saving processes in chemical technology, petrochemistry and biotechnology». Currently, to perform technological calculations of petrochemical complex equipment (PCE), which is the main customer of specialists in the field of 18.03.02, mainly used software packages HYSYS, PRO-II, CHEMCAD, etc. It is a powerful software that allows to carry out process calculations, to carry out simulation, but also to carry out the optimization of individual machines and entire production lines from the point of view of energy and resource consumption. However, when performing calculations, there is a formal approach, and students do not go into the essence of individual processes, especially in the process stage, but only fill in the required specifications of devices. This article proposes the concept of training future specialists on the example of one of the important but energy – consuming processes-rectification. It is shown that when performing laboratory work on the discipline «Computer technology in chemical industries» on the basis of software QBASIC, MS EXCEL, MATHCAD and CHEMSEP are allocated separate blocks. For example, to analyze the influence of pressure on the position of the equilibrium line, the influence of the phlegm number on the position of the working lines on the x, y -diagram, as well as on the size of the column and energy consumption. In the future, performing coursework and graduate work bachelor, students use the appropriate software. The acquired skills will later allow not only to master the software packages of a higher level, but also to successfully apply the acquired knowledge in the workplace.

Keywords: binary mixture, theoretical plates, phlegm number, column, research, modeling

Профессиональная деятельность выпускников по направлению подготовки 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» непосредственно связана с работой на промышленных установках, на которых установлено высокоэффективное технологическое оборудование с современными системами автоматизированного управления, а также с проектированием и внедрением в эксплуатацию экологически безопасных производств [1]. В связи с этим к выпускаемым инженерным кадрам предъявляются высокие требования. Будущие специалисты должны уметь правильно рассчитывать и выбирать оборудование в соответствии с требованиями ГОСТов, грамотно выполнять чертежи аппаратов и технологических схем по правилам единой системы конструкторской документации, моделировать и оптимизировать различные химико-технологические процессы. Все это невозможно представить без использования информационных технологий – текстовых и графических редакторов, языков программирования разного уровня, программ по моделированию как физических процессов, так и отдельных аппаратов и промышленных объектов.

На кафедре «Процессы и аппараты химических и пищевых производств» Волгоградского государственного технического университета при изучении дисциплины «Компьютерные технологии в химических производствах», кроме теоретического курса, в соответствии с учебным планом проводятся лабораторные работы с применением программного обеспечения – QBASIC, MS EXCEL, MATHCAD, CHEMSEP. При выполнении лабораторных работ студенты приобретают базовые знания о современных компьютерных методах расчета и развивают навыки работы с разными прикладными программами.

Цель исследования: формирование у студентов целостного представления о современных программных пакетах, применяемых при выполнении технологических расчетов, а также при обработке результатов экспериментальных и научных исследований.

Материалы и методы исследования

Для решения поставленной цели на кафедре «Процессы и аппараты химических и пищевых производств» разработаны учебные пособия [2, 3], в которых описаны методики проведения лабораторных работ и разработаны индивидуальные задания.

Результаты исследования и их обсуждение

Одним из самых распространенных массообменных процессов, использующихся на химическом производстве, является ректификация. Устройство, принцип действия и методики расчета ректификационных колонн, в которых проводится этот процесс, изучаются на специальном курсе «Процессы и аппараты химической технологии» [4, 5, 6]. Поэтому для

его исследования в учебном процессе проводится несколько лабораторных работ. Теоретические основы процесса ректификации изложены в работе [7]. При проведении лабораторных работ каждый студент получает индивидуальное задание и выполняет его самостоятельно, но все вопросы, возникающие при выполнении работ, обсуждаются с преподавателем.

При выполнении работы «Построение равновесной линии для бинарной смеси процесса ректификации с использованием вычислительной техники» студентам, во-первых, необходимо освоить основы вычислений, которые могут осуществляться на языке программирования QBASIC [8]. Во-вторых, нужно выбрать математическую модель – уравнение Антуана для установления зависимости между давлениями насыщенных паров легколетучего компонента (ЛЛК) и труднолетучего компонента (ТЛК) при разных температурах. В-третьих, построить x , y -диаграмму равновесия для конкретной бинарной смеси, например хлороформ – четыреххлористый углерод (ЧХУ) при атмосферном давлении.

По индивидуальному заданию на x , y -диаграмме (рис. 1) откладываются концентрации хлороформа (ЛЛК) в мольных долях, например: в исходной смеси $x_f = 0,50$; в дистилляте $x_p = 0,90$; в кубовом остатке $x_w = 0,10$.

Известно, что одним из основных технологических параметров при работе ректификационной колонны является флегмовое число (R), влияющее на габаритные размеры колонного аппарата. Так, снижение R увеличивает число теоретических тарелок, но уменьшает диаметр колонны, а повышение R приводит к увеличению диаметра колонн, но при этом снижается их высота [9], поэтому в работе проводится исследование влияния флегмового числа на количество теоретических тарелок на x , y -диаграмме.

Положение рабочей линии для укрепляющей части колонны и величина отрезка B на x , y -диаграмме непосредственно зависят от величины флегмового числа и определяется по

известному уравнению
$$y = \frac{x}{R+1} + \frac{R}{R+1} x.$$

При $R = 4$ отрезок $B = 0,18$ (при $x = 0$ B откладывается на оси y) число теоретических тарелок в укрепляющей части колонны (n_p) – 8, а в исчерпывающей части (n_w) – 9 (рис. 1а), а при $R = 6$ отрезок $B = 0,13$, $n_p = 6,5$; $n_w = 7,2$ (рис. 1б).

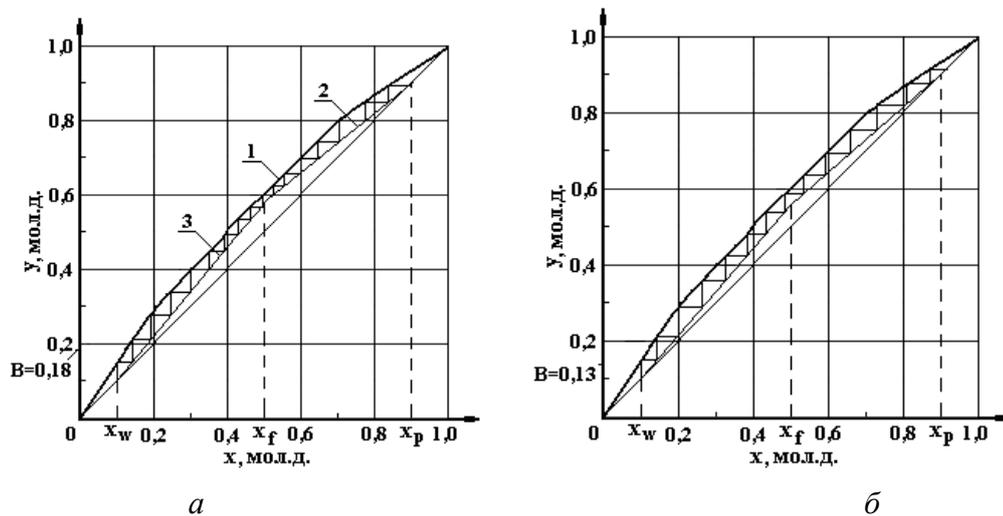


Рис. 1. Определение теоретических тарелок на x, y -диаграмме для бинарной смеси хлороформ – ЧХУ при изменении флегмового числа: 1 – линия равновесия; 2 – рабочая линия для укрепляющей части колонны; 3 – рабочая линия для исчерпывающей части колонны.
 а – флегмовое число $R=4$; б – флегмовое число $R=6$

На следующем этапе изучения процесса ректификации студенты приобретают навыки инженерных расчетов и графических построений при использовании программы MS EXCEL путем реализации методики определения типа математической модели процесса с помощью метода наименьших квадратов. Для конкретной бинарной смеси проводится графическое сравнение экспериментальных данных и полученных уравнений линейной и параболической регрессии. Оценка адекватности установленных уравнений проводится по критерию Фишера. Данная методика применима при расчете процесса ректификации по «ключевым компонентам».

Из математических прикладных программ наибольшее распространение получила MATHCAD. Эта программа имеет широкий набор многофункциональных инструментов, позволяющих решать задачи методами аналитического, численного и графического способов, и применяется при изучении процесса ректификации многокомпонентных смесей.

На крупных химических и нефтеперерабатывающих предприятиях для моделирования производственных установок в последнее время применяются мощные программные обеспечения HYSYS, PRO-II, CHEMCAD и иные, с использованием потенциала которых выбираются наиболее оптимальные условия работы оборудования отдельных стадий и целых производств. Проведение компьютерного моделирования технологических процессов с точки зрения энерго- и ресурсосбережения [10] основано на системном подходе, кроме технологических и экологических показателей, учитывается экономическая эффективность производства.

При выборе математических моделей основной целью математического моделирования [11] является прогнозирование работы технологических систем на стадии проектирования с выявлением всех особенностей реального производства, так как неправильно выбранные критерии для оптимизации производственных процессов могут привести к аварийным ситуациям и большим экономическим потерям. Во многих работах описаны компьютерные модели конкретных химических производств, разработанные с помощью моделирующих программ CHEMCAD [12, 13] и PRO-II [14, 15], и сделан сравнительный анализ расчетных значений с экспериментальными значениями, выявлены пути оптимизации на разных стадиях.

К сожалению, применение в учебном процессе указанных программных пакетов ограничено из-за их высокой стоимости, но многие конкретные задачи, связанные с моделированием и вопросами оптимизации для конкретных процессов, можно решать, например, с помощью таких программ, как CHEMSEP [3].

С помощью программного обеспечения CHEMSEP решаются задачи моделирования процесса ректификации при выполнении лабораторных работ: «Моделирование ректификационной колонны для разделения бинарной смеси» и «Моделирование ректификационной колонны для разделения многокомпонентной смеси». Этапы работы в программе CHEMSEP приведены на рисунке 2.



Рис. 2. Порядок моделирования в программе CHEMSEP

Основная постановка задачи проводимого моделирования в программе CHEMSEP – найти необходимое число теоретических тарелок в ректификационной колонне и тарелку питания для исходной смеси при оптимальном флегмовом числе. Результаты полученного численного моделирования будут напрямую зависеть от умения студента правильно выбрать термодинамические модели (рис. 3): используется метод расчета констант фазового равновесия, коэффициентов активности, давления насыщенных паров и т.д.

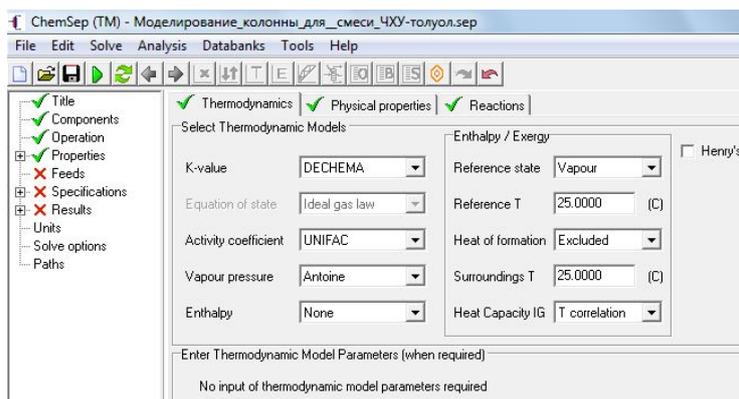


Рис. 3. Выбор термодинамической модели

При выполнении лабораторных работ с помощью программы CHEMSEP студенты учатся выбирать спецификации для ректификационной колонны. Например, по заданию необходимо провести моделирование колонны для разделения бинарной смеси ЧХУ – толуол, содержащей ЛЛК (ЧХУ) 0,50 мольных долей на входе в колонну, при этом необходимо получить состав дистиллята по ЛЛК 0,916 мольных долей, а в кубовом остатке содержание по ЛЛК – 0,084 мольных долей. При успешном проведении моделирования x , y -диаграмма для бинарной смеси ЧХУ – толуол будет иметь вид, представленный на рисунке 4.

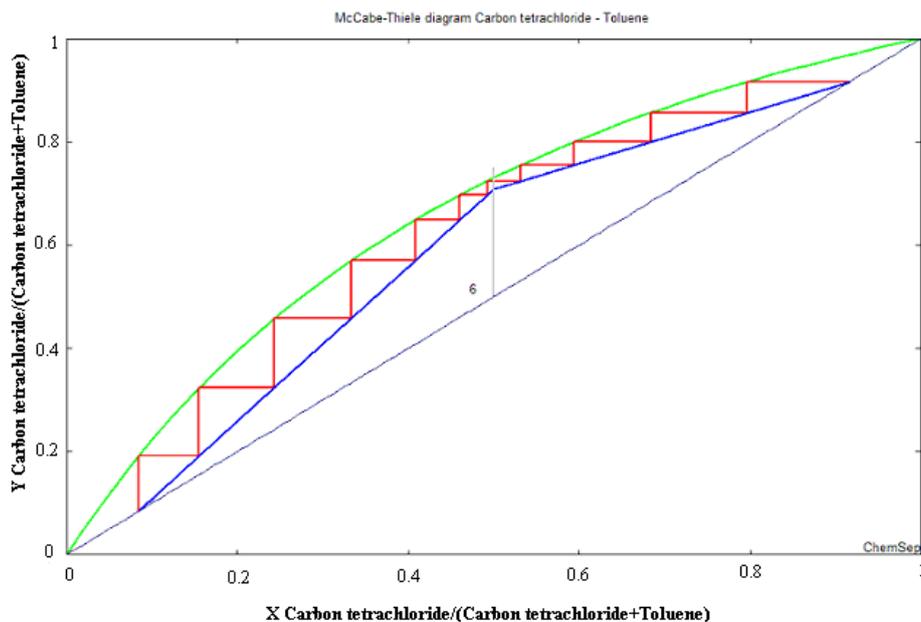


Рис. 4. X, Y-диаграмма для бинарной смеси ЧХУ – толуол, полученная при проведении моделирования

В данном случае именно эти составы по верху и низу колонного аппарата являются выбранными спецификациями для определения тарелки ввода исходной смеси и определения необходимого числа теоретических тарелок. При этом получено оптимальное число теоретических тарелок в укрепляющей части колонны (n_p) – 5, а в исчерпывающей части (n_w) – 6, при $R = 1$. После каждого проведенного расчета анализируются полученные результаты и делается вывод, в нужном ли направлении проводится моделирование. В случае необходимости проводится отладка модели в соответствии с задачей, сформулированной в индивидуальном задании.

Важным моментом проведения лабораторной работы по моделированию ректификационной колонны для разделения многокомпонентной смеси также является задание необходимых спецификаций, правильный выбор которых определит и число теоретических тарелок, и тарелку питания в аппарате, а также позволит с помощью специальной функции параметрического исследования минимизировать флегмовое число.

Например, решается задача: для следующего исходного состава в мол/ч: пропан – 2,27; изобутан – 6,80; н-бутан – 11,34; изопентан – 9,07; н-пентан – 15,88, выбираются два ключевых компонента – это н-бутан (ЛЛК) и изопентан (ТЛК). Первоначально в колонне задаются 11 теоретических тарелок и подача исходной смеси на 6-ю тарелку (сверху вниз). Так как температуры кипения компонентов, входящих в исходную смесь, имеют низкие значения, в аппарате выбирается давление 8 атм. Задаются исходные спецификации продуктов в колонне: расход пара к конденсатору – 79,40 мол/ч и расход дистиллята – 22,18 мол/ч. После проведенного моделирования получено заданное в спецификации количество

дистиллята – 22,18 мол/ч, а кубовой жидкости – 23,18 мол/ч, тепловая нагрузка на кипятильник составляет 0,432 МВт, а $R=2,58$. Однако при этом разделение ключевых компонентов неполное, необходимо провести отладку созданной модели, изменяя общее число тарелок и положение тарелки питания с помощью параметрического исследования.

При первом исследовании изучается, как изменение флегмового числа определяет качество получаемых продуктов (дистиллята и кубового остатка) и влияет на тепловую нагрузку кипятильника. При изменении флегмового числа с минимального $R=1,5$ до максимального $R=6$ увеличивается тепловая нагрузка на кипятильник с 0,309 до 0,825 МВт. Это говорит о возрастании эксплуатационных расходов (греющего агента на кипятильник).

При втором исследовании определяется оптимальное число тарелок для укрепляющей части колонны $n_p=14$ и для исчерпывающей $n_w=12$, и изучается, как количество отбираемого дистиллята влияет на качество получаемых продуктов. При уменьшении отбора дистиллята с 22,18 до 20,41 мол/ч в нем увеличивается количество изобутана с 6,63 до 6,79 мол/ч, а вот количество изопентана снижается с 1,46 до 0,11 мол/ч. Также в кубовом остатке уменьшается количество легколетучих компонентов – изобутана с 0,18 до 0,01 мол/ч, и наоборот, возрастает количество труднолетучих компонентов, например *n*-пентана с 14,62 до 15,22 мол/ч.

Выводы

Разработанная методика проведения лабораторных работ по дисциплине «Компьютерные технологии в химических производствах» с применением современного программного обеспечения позволяет студентам более глубоко освоить процесс ректификации и стимулирует их к неформальному и осмысленному подходу при выполнении технологических расчетов, при обработке результатов экспериментальных и научных исследований, учит анализировать полученные результаты и самостоятельно принимать решения. Приобретенные навыки в дальнейшем позволят не только освоить программные пакеты более высокого уровня, но и успешно применять полученные знания на производстве.

Список литературы

1. Приказ Министерства образования и науки Российской Федерации от 12.03.2015 г. № 227 «Об утверждении Федерального государственного образовательного стандарта высшего образования по направлению подготовки 18.03.02 «Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии» [Электронный ресурс]. URL: <http://base.garant.ru/70929518> (дата обращения: 14.12.2018).

2. Шибитова Н.В., Шибитов Н.С., Новиков А.Е. Лабораторный практикум по компьютерным технологиям: учебное пособие. Волгоград: ВолгГТУ, 2014. 48 с.
3. Волчков В.М., Шибитова Н.В., Шишкин Е.В., Шибитов Н.С. Лабораторный практикум по дисциплине «Компьютерные технологии в химических производствах»: учебное пособие / под ред. В.А. Навроцкого. Волгоград: ВолгГТУ, 2015. 154 с.
4. Касаткин А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии : учебник для ВУЗов. изд. 14-е, стереотип. М.: ООО ИД «Альянс», 2008. 753 с.
5. Основные процессы и аппараты химической технологии: пособие по проектированию / под ред. Ю.И. Дытнерского. 4-е изд., стер. М.: Альянс, 2008. 494 с.
6. Комиссаров Ю.А., Гордеев Л.С., Вент Д.П. Процессы и аппараты химической технологии: учеб. пособие. М.: Химия, 2011. 1229 с.
7. Багатуров С.А. Основы теории и расчета перегонки и ректификации. 3 изд. М.: Химия, 1974. 439 с.
8. Очков В.Ф. Языки программирования GW-BASIC и QBasic: сравнительное описание. М: Энергоатомиздат, 1992. 75 с.
9. Шибитова Н.В., Шибитов Н.С. Основы проектирования оборудования для процесса ректификации: учебное пособие. Волгоград: ИУНЛ ВолгГТУ, 2012. 49 с.
10. Гартман Т.Н. Компьютерное моделирование энерго- и ресурсосберегающих химических производств // Программные продукты и системы. 2002. № 4. С. 29–31.
11. Мальков М.В., Олейник А.Г., Федоров А.М. Моделирование технологических процессов: методы и опыт // Труды Кольского научного центра РАН. 2010. № 3. С. 93-101.
12. 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.
13. Игнатьева А.В. Разработка компьютерных моделей химических производств с применением современных комплексов программ – перспективный путь создания ресурсосберегающих технологий в химической промышленности // Успехи в химии и химической технологии. 2015. Т. XXIX, № 2. С. 12–14.
14. Шибитова Н.В., Шибитов Н.С. Моделирование и расчёт процесса ректификации с использованием программы PRO-II // Известия ВолгГТУ. 2011. № 1. С. 118–120.
15. Шибитова Н.В., Шибитов Н.С., Максименков В.Н., Кузнецов Е.А. Моделирование стадии ректификации в производстве фреона-22 для снижения энергозатрат // Известия ВолгГТУ. 2015. № 1 (154). С. 23–26.