

Міністерство освіти і науки України
Національний технічний університет України «КПІ»
Хіміко-технологічний факультет НТУУ «КПІ»

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В ХІМІЇ, ТЕХНОЛОГІЯХ І СИСТЕМАХ СТАЛОГО РОЗВИТКУ

Київ 13-15 травня 2014 року

ЗБІРНИК НАУКОВИХ СТАТЕЙ

Четвертої міжнародної
науково-практичної конференції



Київ – 2014

УДК 004.94(082)
ББК 32.97я43
К63

Друкується за рішенням Вченої Ради Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут» Міністерства освіти і науки України

Відповідальні за випуск

Т.В. Бойко
Ю.О. Безносик

Редакційна колегія

Кандидат технічних наук, доцент Бойко Т.В.
Кандидат технічних наук, доцент Безносик Ю.О.
Кандидат технічних наук, доцент Бугаєва Л.М.

Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2014: Збірник наукових статей Четвертої міжнар. наук.-практ. конф. – Київ: НТУУ «КПІ», 2014 – 326 с.

ISBN 978-617-696-221-2

Збірник містить наукові статті Четвертої міжнародної науково-практичної конференції «Комп'ютерне моделювання в хімії, технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2014» за такими основними напрямками: комп'ютерна підтримка виробничих процесів, комп'ютерне моделювання хіміко-технологічних та біохімічних процесів і систем, комп'ютерне моделювання в хімії та комп'ютерні методи синтезу нових речовин, комп'ютерне моделювання природоохоронних процесів, сталий розвиток регіонів, комп'ютерно-інформаційні технології в багаторівневій вищій освіті.

Доповіді рецензовані і редаговані Програмним комітетом конференції КМХТ-2014.

ISBN 978-617-696-221-2

© Автори тез доповідей, 2014
© Національний технічний університет України
«КПІ», укладання, оформлення, 2014

УДК 628.16:658.26:681.5

**ЕФЕКТИВНІСТЬ ПРОЦЕДУР СТРУКТУРНОГО ПРОЕКТУВАННЯ
ПРОМИСЛОВИХ СХЕМ ВОДНОГО ГОСПОДАРСТВА**

Шахновський А. М., Квітка О. О., Джигирей І.М.

**ЭФФЕКТИВНОСТЬ ПРОЦЕДУР СТРУКТУРНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЕ
ПРОМЫШЛЕННЫХ СХЕМ ВОДНОГО ХАЗЯЙСТВА**

Шахновский А. М., Квитка А. А., Джигирей И.Н.

**EFFECTIVENESS OF THE PROCEDURES OF STRUCTURAL DESIGN
INDUSTRIAL WATER NETWORKS**

Shakhnovsky A., Kvitka A., Dzhygyrey I.

**Національний технічний університет України
"Київський політехнічний інститут",
ArcadyShakhn@rambler.ru**

Робота присвячена дослідженню робастності комбінаторного підходу до проектування та модернізації схем промислового підприємства, розробці методів підтримки проектних рішень при проектуванні технологічних схем водного господарства. Запропоновано критерії оцінювання процедур структурної оптимізації схем водного господарства. У відповідності до вказаних критеріїв запропоновано математичне забезпечення для процедури проектування схем водного господарства.

Ключові слова: *схеми водного господарства, водоспоживання, водовідведення, очищення води, математичне програмування*

Работа посвящена исследованию робастности комбинаторного подхода к проектированию и модернизации схем промышленного предприятия, разработке методов поддержки проектных решений при проектировании технологических схем водного хозяйства. Предложены критерии оценки процедур структурной оптимизации схем водного хозяйства. В соответствии с указанными критериями предложено математическое обеспечение для процедуры проектирования схем водного хозяйства.

Ключевые слова: *схемы водного хозяйства, водопотребление, водоотведение, очистка воды, математическое программирование*

The work is devoted to investigation of robustness of combinatorial approach to the grassroots and retrofit design of industrial water networks. The evaluation criteria of procedures for structural optimization of water networks were proposed. According to the criteria the mathematical model procedures of water networks design was proposed.

Keywords: *industrial water networks, water usage, water drain, water treatment, superstructure, optimization.*

1. Вступ

Вагомий вплив на баланс водних ресурсів здійснює промисловість, зокрема хімічна галузь. Тому важко переоцінити роль оптимального проектування на стадії

створення або модернізації схем водного господарства (СВГ) – схем водоспоживання і водовідведення (СВС) та схем очищення природних і стічних вод (СВО) як складової частини хіміко-технологічної системи (ХТС).

Водоохоронні заходи систематичного науково-інженерного характеру включають структурну і параметричну оптимізацію одиниць водоспоживання [1]. Під параметричною оптимізацією (ПО СВГ) розуміємо "покращення" параметрів функціонування складових СВГ – одиниць водоспоживання, або заміну останніх; під структурною оптимізацією (СО СВГ) – зміну структури потоків усередині СВС для "максимально повного" використання води у СВГ.

Порівняння згаданих видів оптимізації СВГ, у разі модернізації існуючого виробництва, дозволяє стверджувати, що ПО СВГ, безумовно, ефективна з точки зору економії води, може виявитися економічно менш вигідною, ніж СО СВГ, через технологічну складність і велику вартість необхідних для ПО СВГ заходів.

Методи оптимального технологічного проектування промислового підприємства останнім часом отримали значний розвиток. Різними науковими школами розроблені і доведені до комп'ютерної реалізації процедури проектування різних підсистем СВГ.

Найбільш поширеним сьогодні є комбінаторний підхід на основі математичного програмування, що передбачає побудову та подальшу оптимізацію (спрощення) деякої узагальненої схеми СВС [1], [2]. Слід однак зауважити, через деякі складності застосування комбінаторного підходу (пов'язані насамперед з природою математичного опису, на якому даний підхід базується, з особливостями числового пошуку оптимуму задач математичного програмування [3]), у практиці проектування схем водного господарства тривалий час домінував концептуальний графоаналітичний підхід (пінч-методологія) [4]. Однак концептуальна парадигма проектування виявила суттєві обмеження, зумовлені її евристичним характером. Концептуальний підхід до проектування СВГ, на відміну від альтернативного йому комбінаторного підходу, досить складно формалізується, що створює суттєві перепони при реалізації вказаного концептуального підходу у вигляді програмного забезпечення.

В той же час, складнощі реалізації комбінаторного підходу у перспективі можуть бути нівельовані внаслідок поступу у галузі прикладної математики та підвищення потужності обчислювальної техніки. Так, існують дослідження щодо заходів із подолання вказаних обчислювальних труднощів (локальні оптимуми, висока розмірність задачі, тощо) [3].

Отже, актуальною є сьогодні задача дослідження можливостей застосування та шляхів удосконалення наявних процедур проектування технологічних схем водоспоживання; розроблення методологічного апарату комп'ютерно-інтегрованого проектування технологічних схем водоспоживання.

2. Порівняння деяких поширених підходів до структурної оптимізації схем водного господарства

Комбінаторний підхід СО СВГ набув широкого поширення в практиці технологічного проектування ХТС. Зокрема, оригінальні формулювання задач математичного програмування та процедури СО СВГ на основі цих формулювань запропоновано у [5] (позначимо коротко вказаний підхід як «підхід А»), а також у [6] («підхід В»), у [7] («підхід С»), у [8] («підхід D»), у [9] («підхід Е»), у [10] («підхід F»), у [11] («підхід G»).

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРИРОДООХОРОННИХ ПРОЦЕСІВ

Внаслідок існування значної кількості підходів до СО СВГ, запропонованих різними дослідниками, вибір ефективної процедури (та відповідного прикладного програмного забезпечення) для потреб проектування є досить важким. Тому надзвичайно важливою є задача аналізу специфічних особливостей та дослідження ефективності найбільш поширених підходів до СО СВГ, що базуються на математичному програмуванні, що входило у задачі представленої роботи.

Запропоновані у літературі ([5-11]) підходи до СО СВГ об'єднує представлення задачі оптимізації СВГ (СВС та СВО) у якості задачі математичного програмування того чи іншого класу – задачі лінійного програмування (ЛП) або нелінійного програмування (НЛП), неперервного, дискретного нелінійного (ЗНДП) або лінійного програмування, задачі частково-дискретного програмування, тощо. Спільним у вказаних підходах є також використання цільової функції (технологічної або економічної природи) у якості «рушійної сили» процедури оптимізації, та системи обмежень на основі матеріальних балансів. Згадані обмеження мають на меті утримання результатів оптимізації в межах технологічної доцільності і припустимості. Результатами оптимізації у різних підходах є ті чи інші параметри, що визначають структуру СВГ: коефіцієнти структурного розділення потоків або значення витрат потоків СВГ.

Крім вказаних характеристик, підходи А-Г ([5-11]) у представленому дослідженні було порівняно за можливістю впровадження різних типів повторного використання води (без часткового очищення забрудненої води, з частковим очищенням забрудненої води, з виходу водоспоживача (ВС) безпосередньо на вхід того ж водоспоживача – рецикл); за наявністю (у явному вигляді) значень витрат та якості стічної води, що полишає виробничий майданчик (надходить на очищення «в кінці труби»). Бралися до розгляду також вимоги до вихідних даних для розрахунку СВГ: можливість врахування втрат води, врахування декількох зовнішніх джерел свіжої води (за номінальними обсягами водопостачання та якістю води), зафіксовані заздалегідь чи змінні значення номінальних витрат води для кожного ВС. Насамкінець, процедури оптимізації порівнювалися за типом цільової функції та можливістю зменшення кількості взаємозв'язків (трубопроводів для передачі води повторного використання). Результати порівняння представлено у табл. 1.

Таблиця 1

Порівняння процедур структурної оптимізації схем водного господарства

Характеристика \ Підхід	А	В	С	D	Е	F	G
1. Врахування процесів часткового очищення	–	+	+	+	+	–	–
2. Клас задачі математичного програмування	ЗНЛП	ЗНЛП або ЗНДП	ЗНЛП	ЗНЛП або ЗНДП	ЗНЛП або ЗНДП	ЗНЛП	ЗНЛП
3. Можливість часткового очищення забрудненої води	–	+	+	+	+	–	–
4. Можливість рециклу	+	–	–	+	+	–	–
5. Врахування значень витрат води, що полишає виробничий майданчик	–	+	+	+	+	+	+

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРИРОДООХОРОННИХ ПРОЦЕСІВ

Характеристика \ Підхід	А	В	С	D	E	F	G
6. Врахування якості води, що полишає виробничий майданчик	-	+	-	-	+	-	+
7. Необхідність фіксованої витрати води для кожного водоспоживача	+	-	-	-	+	+	+
8. Врахування втрат води	+	-	-	-	-	+	+
9. Врахування декількох джерел води	+	-	+	-	-	+	-
10. Цільова функція має технологічний сенс	+	+	+	-	+	+	+
11. Цільова функція має технологічний сенс	-	-	+	+	+	+	-
12. Можливість мінімізації кількості взаємозв'язків	-	+	-	-	+	-	-

Як видно з табл. 1, у низці досліджених підходів не передбачено врахування втрат води в процесі водоспоживання, випадку з декількома джерелами свіжої води з обмеженням її якості та обсягів водоспоживання. Не позбавлена суттєвих недоліків також процедура СО СВГ [1, 5], яка була розроблена і нині використовується для практичних потреб авторами цього дослідження. Так, дана процедура передбачає оптимізацію фіксованої витрати води на вході водоспоживачів, що принципово важливо при модернізації СВГ, але обмежує універсальність підходу.

Узагальнюючи, можна виділити, зокрема, такі основні недоліки запропонованих підходів до СО СВГ:

- неможливість врахування процесів часткового очищення;
- відсутність (у явному вигляді) характеристик води, що полишає виробничий майданчик (надходить на очищення «в кінці труби»);
- неможливість врахування втрат води в процесі водоспоживання та водоочищення;
- необхідність фіксованої витрати води на вході водоспоживача (при проектуванні СВГ для потреб нового виробництва);
- неможливість врахування декількох зовнішніх джерел свіжої води та їх характеристик;
- неможливість мінімізації кількості взаємозв'язків між процесами (для скорочення витрат на впровадження та експлуатацію оптимізованої СВГ).

3. Збільшення ефективності процедур структурної оптимізації схем водного господарства

Як показано вище, збільшення ефективності вказаних процедур СО СВГ може бути здійснене у напрямі врахування часткового очищення води в схемі, типу повторного використання, тощо.

За результатами представленого вище порівняння, для подальших розрахунків щодо збільшення ефективності було обрано процедуру структурної оптимізації СВГ з [6], яка може бути визнана найбільш універсальною з розглянутих (призначена для оптимізації СВГ з частковим очищенням потоків води, з врахуванням взаємного впливу між процесами, витрат частково очищеної води та масового навантаження

забруднювача на процес очищення на етапі проектування). Як інші подібні процедури, дана процедура СО СВГ базується на надструктурному принципі.

4. Висновки

Виділені у даному дослідженні типові характеристики процедур параметричного проектування схем водного господарства промислових підприємств є спробою об'єктивної оцінки ефективності даних процедур. Запропонований у роботі математичний опис та процедура СО СВГ на його основі відповідають багатьом з даних характеристик, що підтверджують наведені ілюстративні приклади.

Зазначимо, що у залежності від потреб конкретної СВГ із системи обмежень можуть бути виключені ті обмеження, що є неактуальними у даному конкретному випадку (наприклад, при відсутності вагомих втрат у досліджуваних процесах водоспоживання та водоочищення, при неможливості реалізації часткового очищення води, тощо). При цьому досі вимагає вирішення задача формалізації процесу складання математичного опису під конкретну прикладну задачу.

Слід також зауважити, що, будучи запропонованими для впровадження, вдалі в математичному сенсі технічні рішення в ряді випадків не знаходять відгуку у вітчизняних виробників.

На думку авторів, причиною відмови від впровадження згаданих прогресивних розробок, крім недостатньо ефективного законодавства з охорони водних ресурсів, є наступний факт. Загальноприйняте обґрунтування доцільності реалізації проекту – розрахунок очікуваного економічного ефекту, – виявляється неефективним, недостатньо переконливим для осіб, які приймають рішення щодо впровадження вказаних розробок. Зокрема, у разі схем повторно-багаторазового водопостачання та розподіленого очищення розрахункове значення чистого економічного ефекту традиційно не враховує ринкові ризики.

У зв'язку з цим автори вважають доцільним розвиток наступних підходів, що доповнюють один одного:

1. Багатоваріантний розрахунок економічного ефекту шляхом варіювання в деякому діапазоні показників економічного ефекту, побудова та аналіз наочних «поверхонь відгуку» економічного ефекту (*техніко-економічний підхід*).

2. Імітаційне моделювання роботи схем водного господарства та (або) технологічного процесу в цілому до і після оптимізації в режимі нормальної експлуатації та при порушенні технологічного режиму (*технологічний підхід*).

3. Формулювання та розрахунок індикаторів водо-ефективності (*узагальнений підхід на основі теорії сталого промислового розвитку*).

Література

1. *Шахновский А.М.* Структурная оптимизация схем промышленного водопотребления [Текст] / А.М. Шахновский, Г. А. Статюха, А.А. Квитка // Вісник Черкаського державного технологічного університету. – 2004. – №3. – С. 149-153.

2. *Takata N.* Optimal water allocation in a petroleum refinery [Текст] / N. Takama, T. Kuriyama, K. Shiroko, T. Umeda // Computers & Chemical Engineering. – 1980. – Т. 4, №4. – С. 251 – 258.

3. *Шахновський А. М.* Проблема оптимальності в задачах синтезу схем промислового водоспоживання [Текст] / А.М. Шахновський, Я.М. Єжовський, Г. О. Статюха, О. О.Квитка // Наукові вісті НТУУ “КПІ”. – 2004. – №6. – С. 35-41.

4. *Wang, Y.P.* Wastewater minimization [Текст] / Y.P. Wang, R. Smith // Chem Eng Sci. – 1994. – Т. 49, №7. – С. 981-1006.
5. *Статюха, Г.О.* Моделювання схем промислового водоспоживання на основі методу структурних параметрів [Текст] / Г. О. Статюха, О. О. Квітка, А. М. Шахновський // Экотехнологии и ресурсосбережение. – 2003. – №5. – С. 57-62.
6. *Feng, X.* Grass-roots design of regeneration recycling water networks [Текст] / X. Feng, J. Bai, H. Wang, X. Zheng // Computers & Chemical Engineering. – 2008. – Т. 32, №8. – С. 1892-1907.
7. *Faria, D.C.* Optimization of water networks in industrial processes [Текст] / D.C. Faria, A. Souza, S. M Arruda, G.U. Souza // Journal of Cleaner Production. – 2009. – Т.17. – С. 857–862.
8. *Matijasevic, L.* A water network optimization using MATLAB-A case study [Текст] / L. Matijasevic, I. Dejanovic, D. Spoja // Resources, Conservation and Recycling. – 2010. – Т. 54. – С. 1362–1367.
9. *Koppol, A.* On zero water discharge solutions in the process industry [Текст] / M. Bagajewicz, B. Dericks, M. Savelski // Advances in Environmental Research. – 2003. – Т. 8.– С. 151-171.
10. *Lim, S.* Analysis of effects of an objective function on environmental and economic performance of a water network system using life cycle assessment and life cycle costing methods [Текст] / S.R. Lim, D. Park, J. M. Park // Chemical Engineering Journal. – 2008. – Т. 144. – С. 368–378.
11. *Tiana, J.R.* A process integration approach to industrial water conservation: A case study for a Chinese steel plant [Текст] / J.R. Tiana, P.J. Zhoua, B. Lv // Journal of Environmental Management. – 2008. – Т. 86. – С. 682–687.
12. *Savelski, M.* On the use of linear models for the design of water utilization systems in refineries and process plants [Текст] / M. Savelski, M. Bagajewicz // Annual American Institute of Chemical Engineering meeting. Dallas. Chemical Engineering Research & Design. – 2000. – submitted.
13. *Kuo, W.-C. J.* Designing for the interactions between water-use and effluent treatment [Текст] / W.-C. J. Kuo, R. Smith // Transactions of International Chemical Engineering. Part A. 1998. – № 76. – С. 287–301.
14. *Gunaratnam, M.* Automated design of total water systems. [Текст] / M. Gunaratnam, A. Alva-Argaez, A. Kokossis, J.-K. Kim, R. Smith // Industrial & Engineering Chemistry Research. – 2005 – Т. 44 – С. 588–599.