Звіт по магістерській роботі

Тема: «Визначення індикаторів сталого розвитку з використанням сучасних програмних комплексів

Виконав:
магістрант VI курсу
ХТФ, гр. ХА-61
Задорожний А.С.
Науковий керівник:
Бугаєва Л.М.

Київ 2011

Алгоритм WAR (WASTE REDUCTION algorithm)

WAR алгоритм враховує ймовірність різних впливів на навколишнє середовище, потенційний вплив на навколишнє середовище (PEI), який можуть викликати хімічні речовини, що використовуються і виробляються в результаті хімічного процесу. Реакції, які перетворюють хімічні речовини з менш екологічно шкідливих в більш екологічно шкідливі призводять до збільшення PEI, пов'язаних з процесом.

WAR вважається одновимірним показника стійкості, оскільки він розглядає тільки екологічні аспекти хімічного процесу.

Типи впливів на навколишнє середовище, які оцінюються WAR

Загальна категорія впливу	Категорія впливу	Категорія ступеня впливу
На людей	Продукти харчування	Летальна доза (50%) – LD50
	Шкіряний покрив/ дихальні шляхи	OSHA
На природу	Забруднення води	Летальна концентрація – LC50
	Забруднення грунту	LD50
Гглобальний вплив на атмосферу	Глобальне потепління	GWP
	Виснаження озонового шару	ODP
Регіональний атмосферний вплив	Кислотні дощі	AP
	Формування смогу	PCOP

OSHA – допустимі межі впливу, встановлені Міністерстом охорони здоров’я США.

Математична модельWAR

- $\frac{dI_{syst}}{dt} = \dot{I}_{in} - \dot{I}_{out} + \dot{I}_{gen}$
- $\dot{I}_{in} = \sum_{i}^{EnvCat} \sum_{j}^{\substack{Inlet \\ Streams}} \sum_{k}^{Component} \alpha_i \dot{M}_j^{(in)} x_{k,j} \psi_{k,i}^{s}$
- $\dot{I}_{out} = \sum_{i}^{EnvCat} \sum_{j}^{\substack{Outlet \\ Streams}} \sum_{k}^{Component} \alpha_i \dot{M}_j^{(out)} x_{k,j} \psi_{k,i}^{S}$

де I_{syst} виражає потенційний екологічний вплив всередині процесу, I_{in} показує ступінь потенційного впливу на вході, I_{out} показує ступінь потенційного впливу на виході, а також I_{gen} є ступінь , з яким вплив утворюється в системі, в результаті хімічних реакцій.

Програми для оцінки сталості ХТС

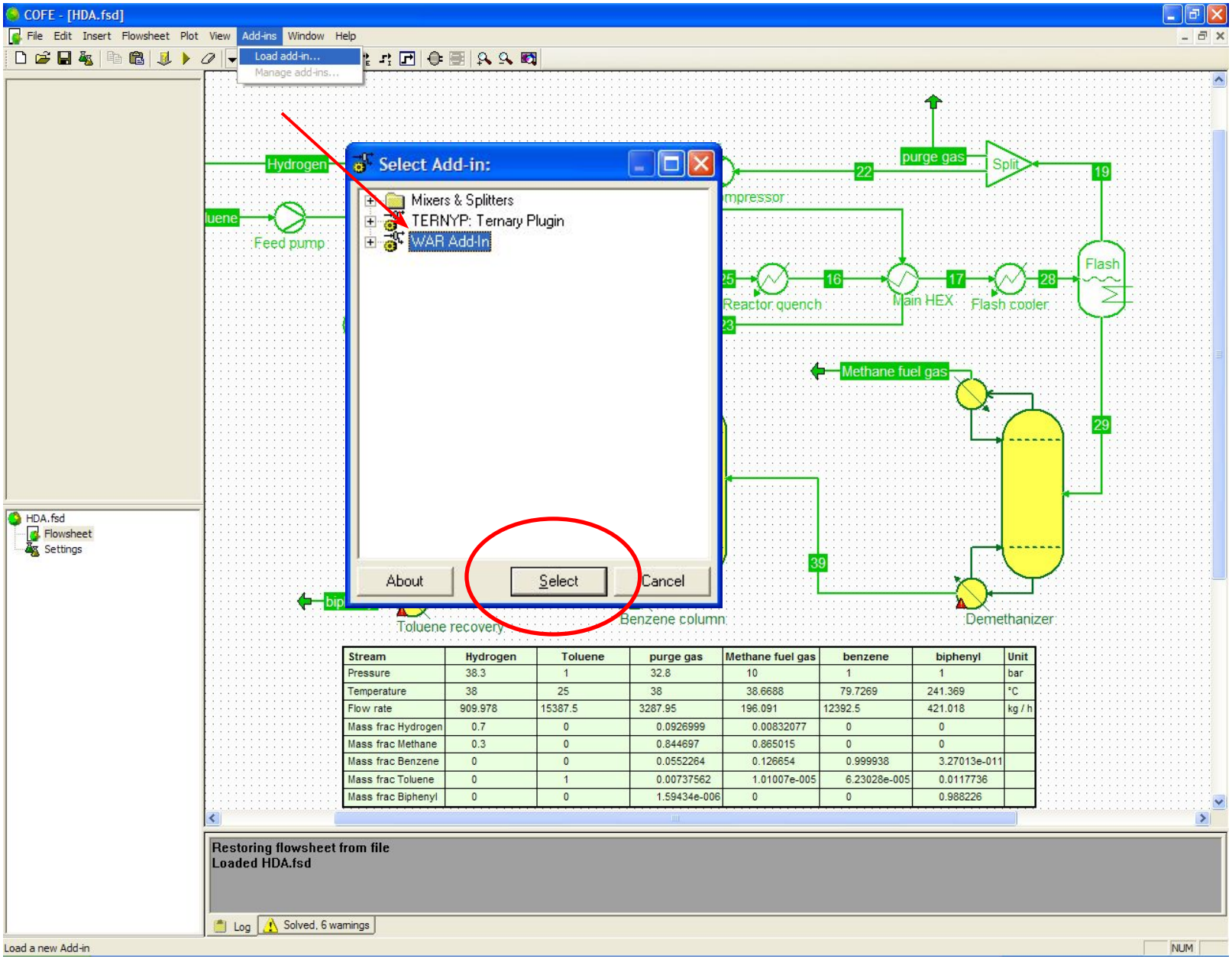
Вільне ПЗ (за стандартом CAPE-OPEN):

- COFE (ver. 2.3.1);
- WAR GUI (ver. 1.0.17);
- Advanced Process Analysis System (ver. 1.0.0);

Комерційне ПЗ:

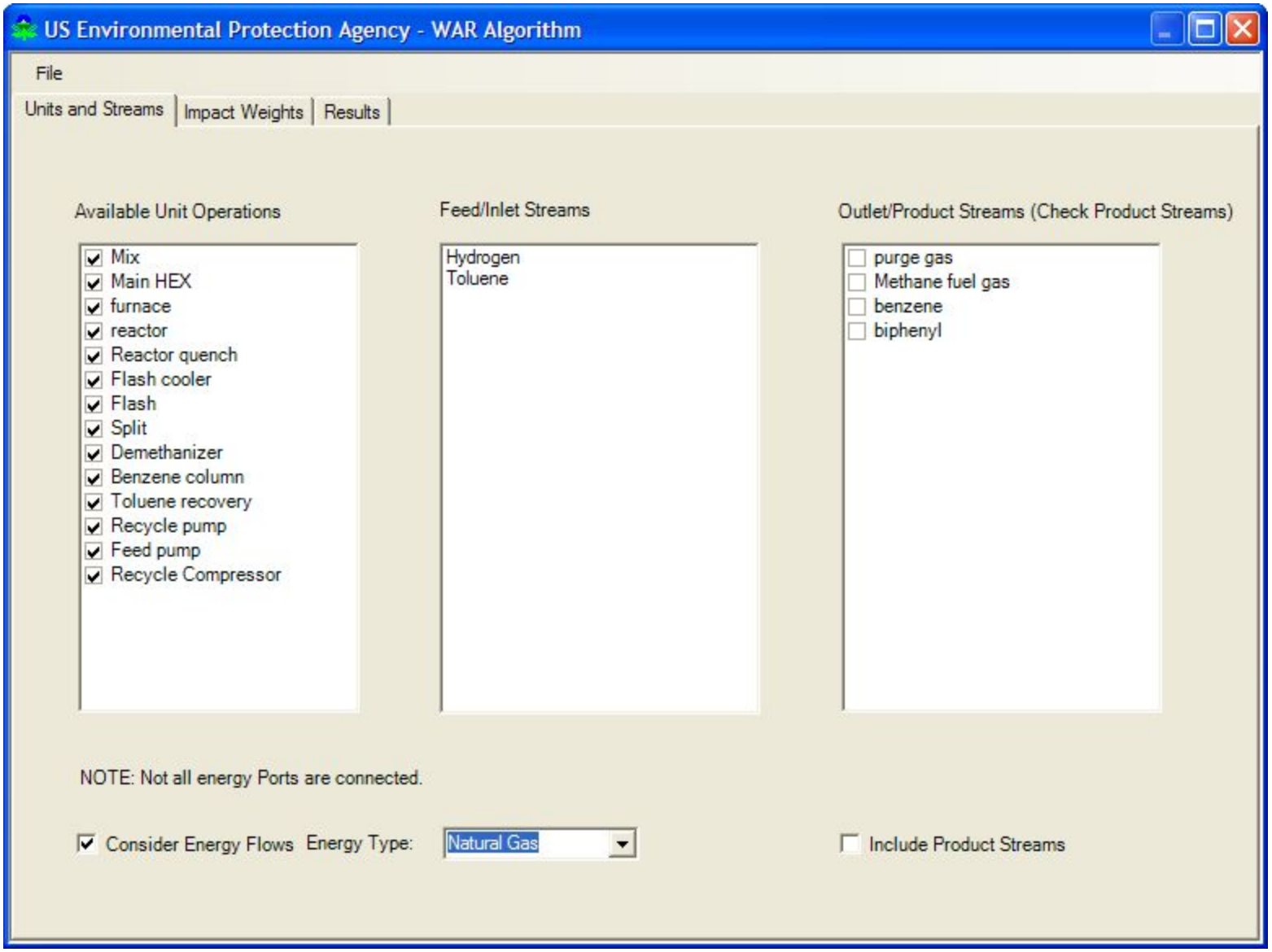
- HYSYS 2006 + gPROMS + ENVOPExpert
- ChemCAD 6.3.1 + WAR Module;

Використання WAR в COFE

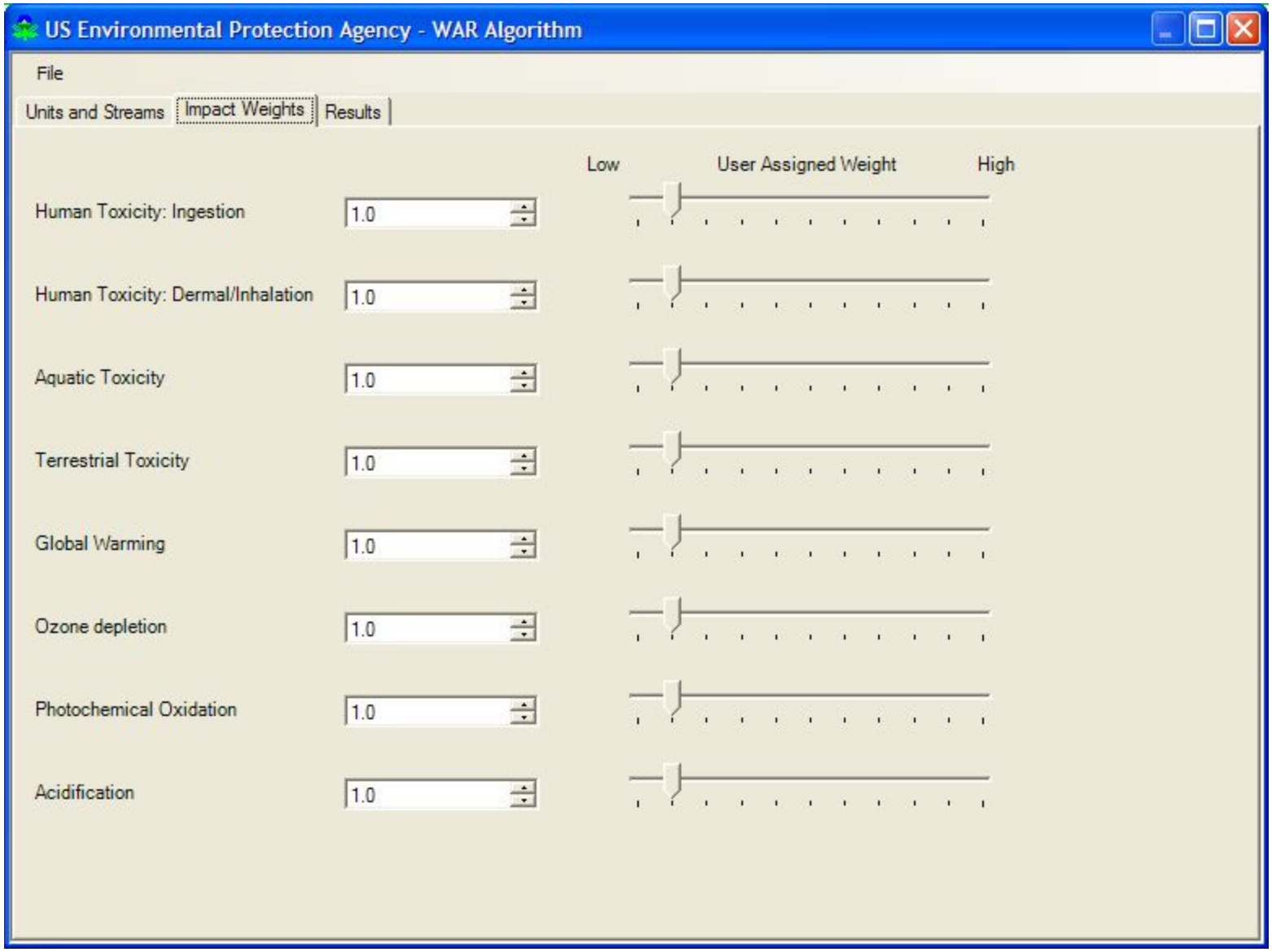


Stream	Hydrogen	Toluene	purge gas	Methane fuel gas	benzene	biphenyl	Unit
Pressure	38.3	1	32.8	10	1	1	bar
Temperature	38	25	38	38.6688	79.7269	241.369	°C
Flow rate	909.978	15387.5	3287.95	196.091	12392.5	421.018	kg / h
Mass frac Hydrogen	0.7	0	0.0926999	0.00832077	0	0	
Mass frac Methane	0.3	0	0.844697	0.865015	0	0	
Mass frac Benzene	0	0	0.0552264	0.126654	0.999938	3.27013e-011	
Mass frac Toluene	0	1	0.00737562	1.01007e-005	6.23028e-005	0.0117736	
Mass frac Biphenyl	0	0	1.59434e-006	0	0	0.988226	

Використання WAR в COFE



Використання WAR в COFE



Використання WAR в COFE

US Environmental Protection Agency - WAR Algorithm

File

Units and Streams | Impact Weights | Results

Iout PEI/hour	Iout PEI/kg	Igen PEI/hour	Igen PEI/kg	Ie
6.328E+003	N/A	-1.574E+004	N/A	0.

Individual impact categories

Total output rate of PEI (PEI/hour)

HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
1.48E+003	1.94E+002	1.48E+003	2.70E+002	1.65E+001	0.00E+000	2.

Total PEI leaving the system per mass of products (PEI/kg product)

HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/

Total generation rate of PEI (PEI/hour)

HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
3.25E+002	1.89E+002	3.25E+002	9.63E+001	1.50E+001	0.00E+000	-1

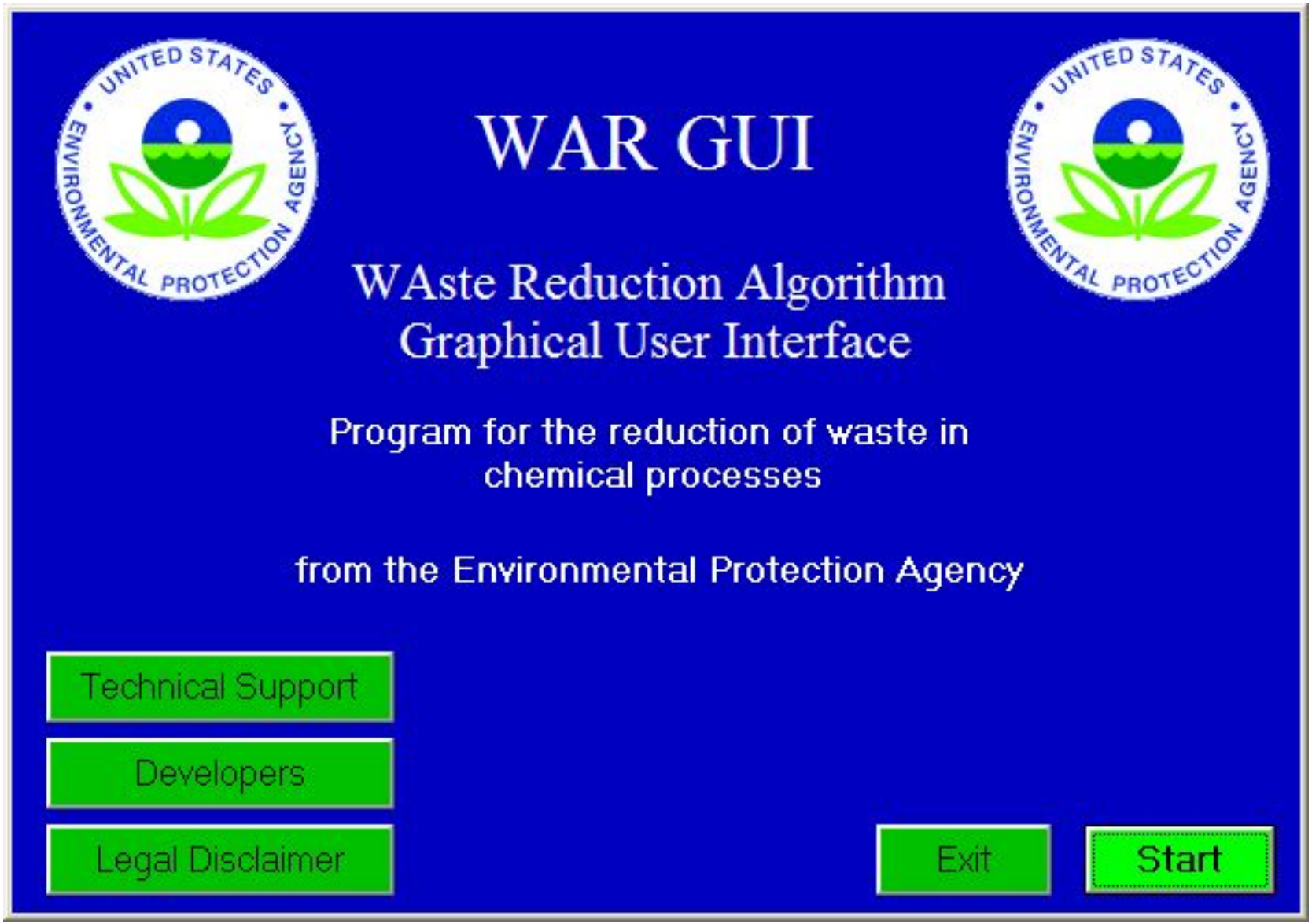
Total PEI generated within a system per mass of products (PEI/kg product)

HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/

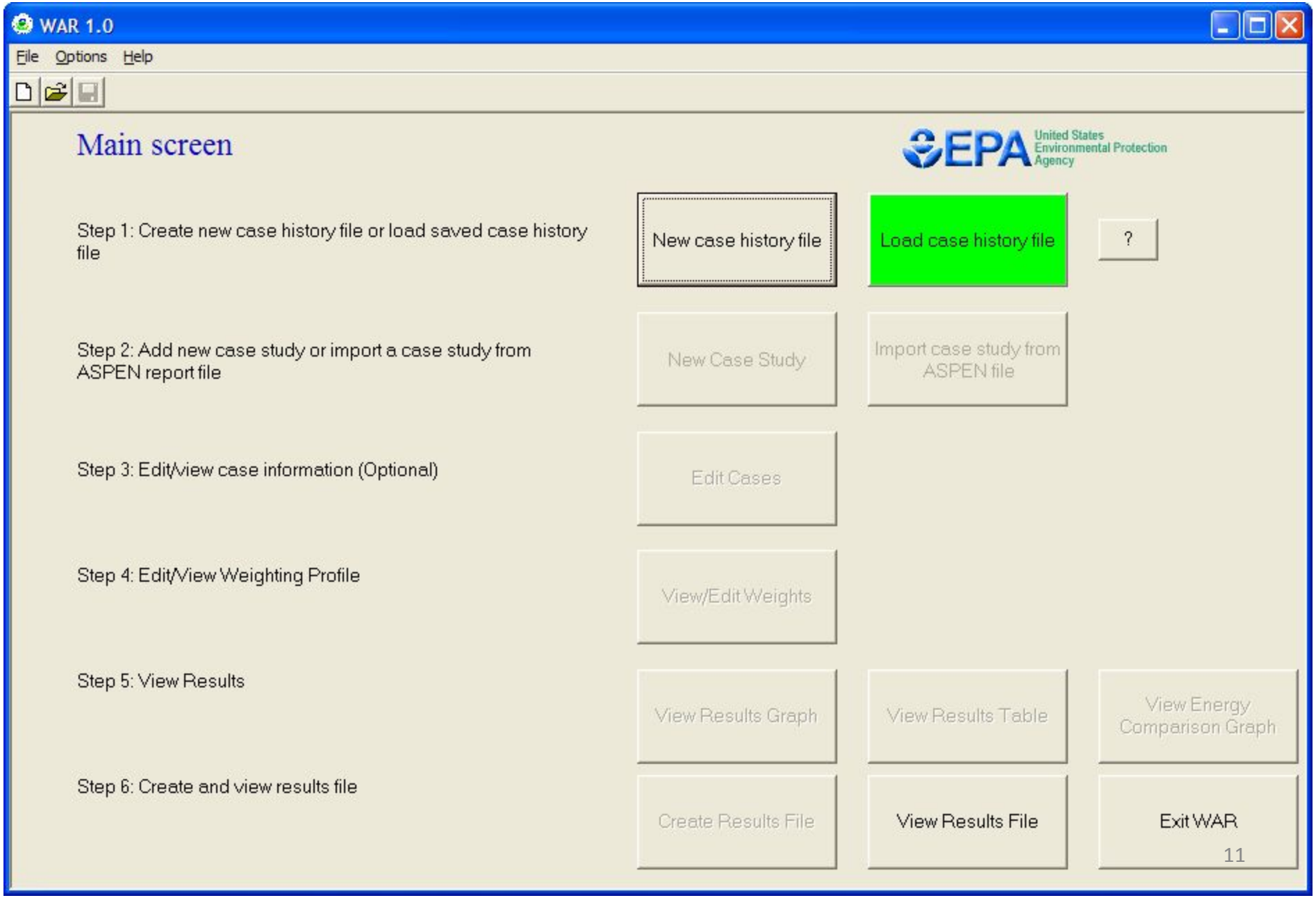
Output rate of PEI from energy usage (PEI/hour)

HTPI	HTPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PC
0.00E+000	0.00E+000	0.00E+000	0.00E+000	0.00E+000	0.00E+000	0.

Використання WAR GUI



Використання WAR GUI



Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR

File Help

ASPEN components screen

Instructions: double click on the red chemical name fields to select the desired chemicals

Note: If only one compound in the database matches the formula in the ASPEN file, the name and CAS # will be automatically filled in.

Aspen component list

ID	Type	Formula	Name	ReportName	Chemical Name
NAPHT-01	C	C10H8	C10H8	NAPHT-01	NAPHTHALENE
PHTHA-01	C	C8H4O3	C8H4O3	PHTHA-01	PHTHALIC ANHYDRIDE
MALEI-01	C	C4H2O3	C4H2O3	MALEI-01	MALEIC ANHYDRIDE
NAPHQ-02	C	C10H6O2	C10H6O2	NAPHQ-02	
CARBO-01	C	CO2	CO2	CARBO-01	CARBON DIOXIDE
CARBO-02	C	CO	CO	CARBO-02	CARBON MONOXIDE
OXYGE-01	C	O2	O2	OXYGE-01	OXYGEN
NITRO-01	C	N2	N2	NITRO-01	NITROGEN
WATER	C	H2O	H2O	WATER	WATER

EPA United States Environmental Protection Agency

Delete chemical | Cancel | Finish

Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR

File Help

Look up formula screen

Aspen Component Descriptors

ID: NAPHQ-02

Type: C

Formula: C10H6O2

Name: C10H6O2

Report Name: NAPHQ-02

Chemicals with formula of: C10H6O2

Name

☑ Assign ASPEN ID to highlighted chemical in list above

Add New | Cancel | OK

EPA United States Environmental Protection Agency

Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR

File Help

Add from user data screen

EPA United States Environmental Protection Agency

Chemical Data

Name: NAPHQ-02

CAS#: test1

Formula: C10H6O2

Molecular weight: 0.5 gm/mol

Impact category data

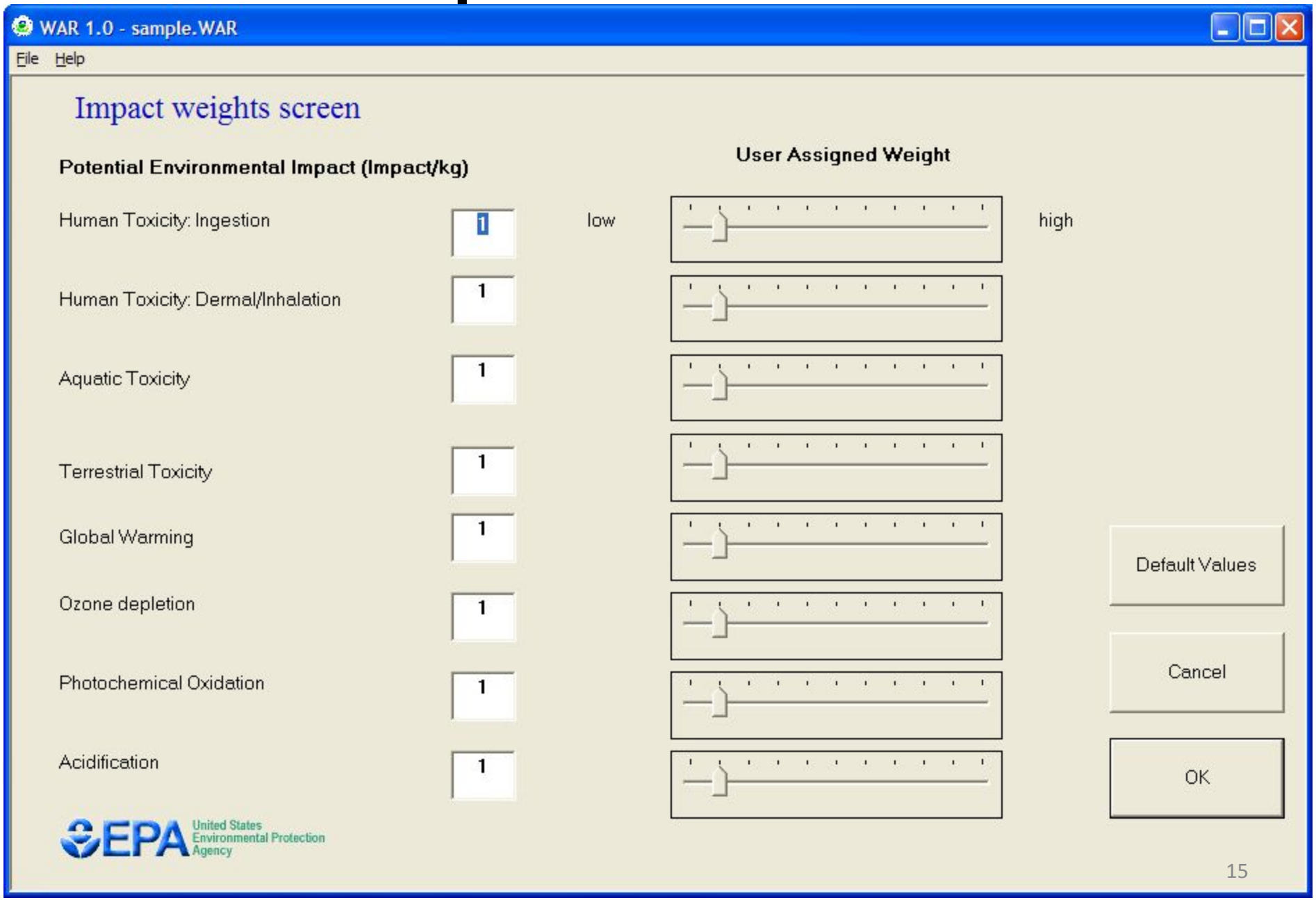
	Impact Value		Normalized Score
Rat Oral LD50 (HTPI and TTP):		mg/kg	
OSHA TWA PEL (HTPE):		mg/m^3	
Fathead Minnow LC50 (ATP):		mg/L	
Global Warming Potential (GWP):			
Ozone Depletion Potential (ODP):			
Photochemical Oxidation Potential (PCOP):			
Acidification Potential (AP):			

Calculate Scores

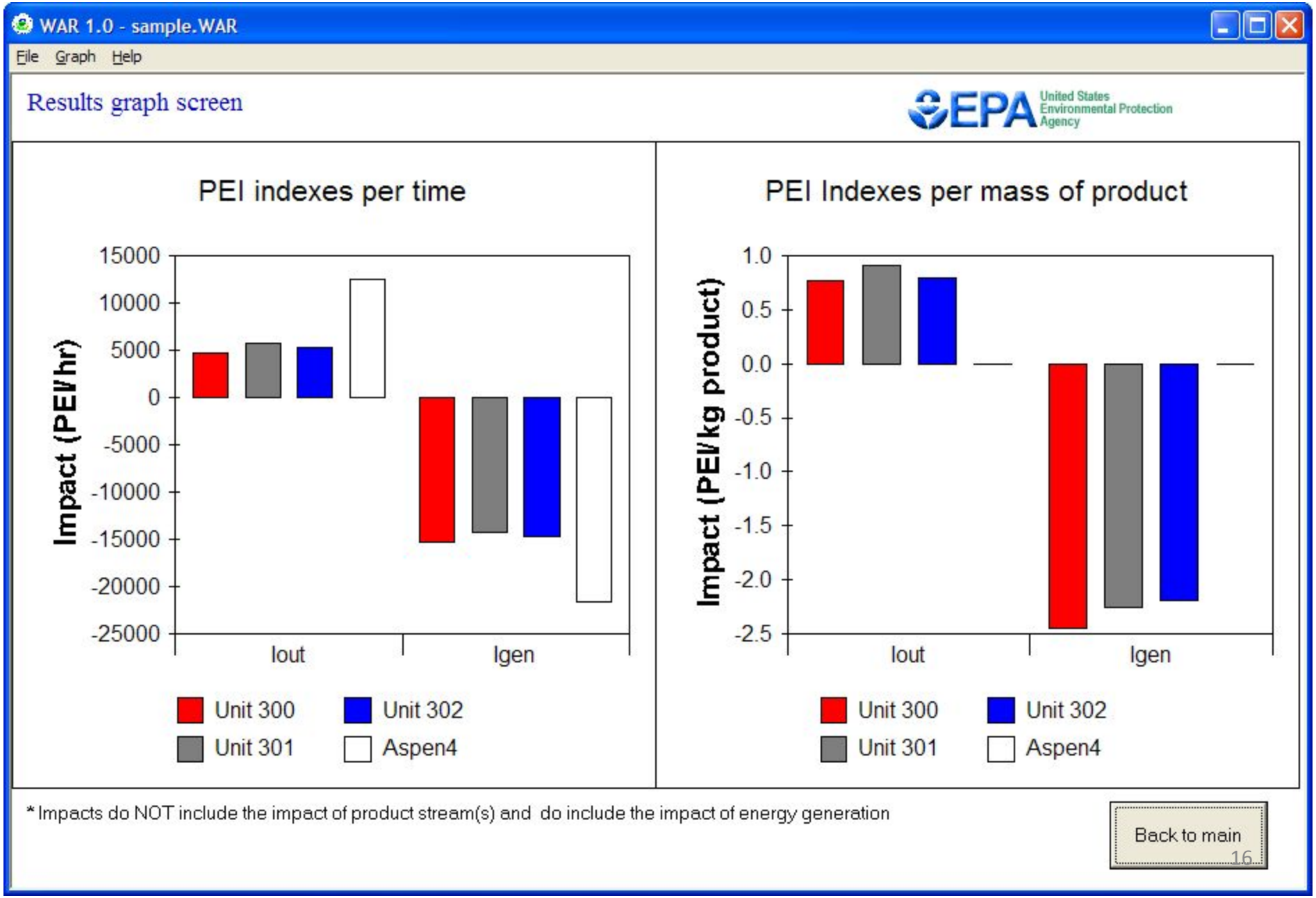
Cancel

Add

Використання WAR GUI



Використання WAR GUI



Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR

File Table Help

Results table screen

EPA United States Environmental Protection Agency

Total PEI indexes*

Case	Iout PEI/hr	Iout PEI/kg	Igen PEI/hr	Igen PEI/kg	Ienergy PEI/kg	Ienergy PEI/kg
Unit 300	4.768E+3	7.645E-1	-1.527E+4	-2.448E+0	1.702E+3	2.728E-1
Unit 301	5.733E+3	9.067E-1	-1.430E+4	-2.262E+0	1.814E+3	2.869E-1
Unit 302	5.342E+3	7.995E-1	-1.469E+4	-2.199E+0	1.919E+3	2.873E-1
Aspen4	1.251E+4	N/A	-2.168E+4	N/A	0.000E+0	N/A

* Impacts do NOT include the impact of product stream(s) and do include the impact of energy generation

OK

Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR - [C:\Program Files\WAR GUI\MyFiles\sample.txt]

File Edit Results File Help

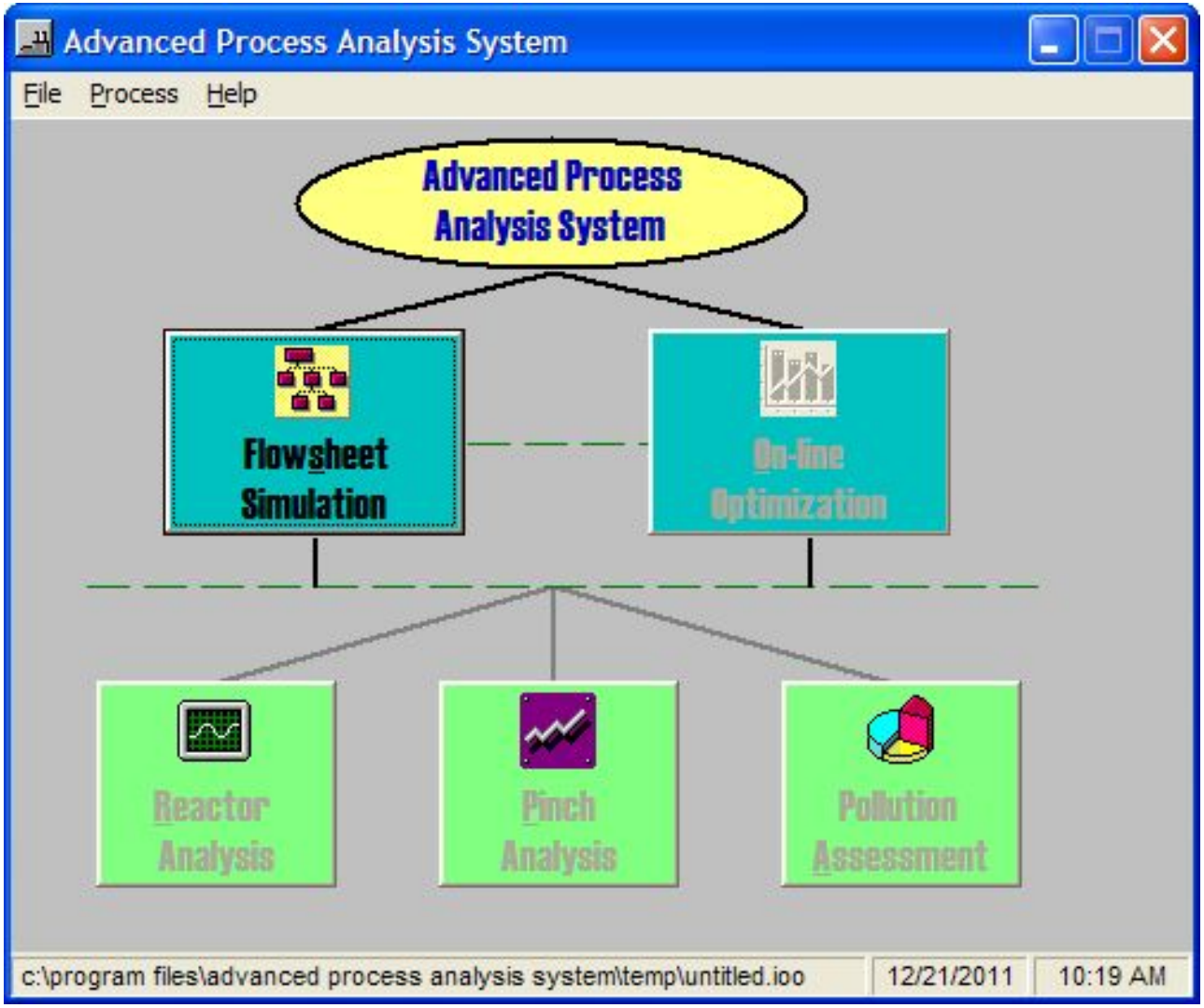
Results file screen

```
Unit 302    5.342E+3    7.995E-1    -1.469E+4    -2.199E+0    1.919E+3    2.873E-1

Individual impact categories

Total output rate of PEI (PEI/hr)
Case        HTPI        HTPE        TTP         ATP         GWP         ODP         PCOP        AP          TOTAL
Unit 300    1.60E+02    1.26E+01    1.60E+02    7.36E+01    5.02E+01    5.24E-04    2.77E+03    1.54E+03    4.77E+03
Unit 301    9.80E+01    7.47E+00    9.80E+01    7.63E+01    5.34E+01    5.58E-04    3.76E+03    1.64E+03    5.73E+03
Unit 302    8.06E+01    5.78E+00    8.06E+01    7.97E+01    5.64E+01    5.91E-04    3.30E+03    1.74E+03    5.34E+03

Total PEI leaving the system per mass of products (PEI/kg product)
Case        HTPI        HTPE        TTP         ATP         GWP         ODP         PCOP        AP          TOTAL
Unit 300    2.57E-02    2.02E-03    2.57E-02    1.18E-02    8.05E-03    8.40E-08    4.44E-01    2.47E-01    7.65E-01
Unit 301    1.55E-02    1.18E-03    1.55E-02    1.21E-02    8.44E-03    8.83E-08    5.94E-01    2.60E-01    9.07E-01
Unit 302    1.21E-02    8.65E-04    1.21E-02    1.19E-02    8.44E-03    8.84E-08    4.94E-01    2.60E-01    7.99E-01

Total generation rate of PEI (PEI/hr)
Case        HTPI        HTPE        TTP         ATP         GWP         ODP         PCOP        AP          TOTAL
Unit 300    1.60E+02    1.11E+01    1.60E+02    7.36E+01    5.02E+01    5.24E-04    -1.73E+04   1.54E+03    -1.53E+04
Unit 301    9.80E+01    5.99E+00    9.80E+01    7.63E+01    5.34E+01    5.58E-04    -1.63E+04   1.64E+03    -1.43E+04
Unit 302    8.06E+01    4.30E+00    8.06E+01    7.97E+01    5.64E+01    5.91E-04    -1.67E+04   1.74E+03    -1.47E+04

Total PEI generated within a system per mass of products (PEI/kg product)
Case        HTPI        HTPE        TTP         ATP         GWP         ODP         PCOP        AP          TOTAL
Unit 300    2.57E-02    1.79E-03    2.57E-02    1.18E-02    8.05E-03    8.40E-08    -2.77E+00   2.47E-01    -2.45E+00
Unit 301    1.55E-02    9.47E-04    1.55E-02    1.21E-02    8.44E-03    8.83E-08    -2.57E+00   2.60E-01    -2.26E+00
Unit 302    1.21E-02    6.43E-04    1.21E-02    1.19E-02    8.44E-03    8.84E-08    -2.50E+00   2.60E-01    -2.20E+00
```

United States Environmental Protection Agency

Close

Використання WAR в Advanced Process Analysis System



Використання WAR в Advanced Process Analysis System

Pollution Index Program - [Process]

Process Help

Stream List

Stream Name	Total Flowrate	Type
AC02	0.16	Input
AC45	0.16	Non-Product
C320	0.0415	Product
C328	0.05336	Product

Add Stream to list | Update Stream Information | Delete Stream

Stream Name: C320

Specify: Flowrates of Components / Mass/Mole Fractions for Components

Components Data

Component Name	Mass/Mole Fraction
1	0.09271
3	0.80185
4	0.09674
5	0.00534

Total Flowrate: 0.0415

Stream Type: Product

Proceed

Variables

Name	Description
FAC34	Total Mass Flowrate
FAC45	Acid Flowrate
FC308	Mass Flowrate
FC316	Total Mass Flowrate
FC320	Total Mass Flowrate
FC322	Total Mass Flowrate

Value = 0.04588

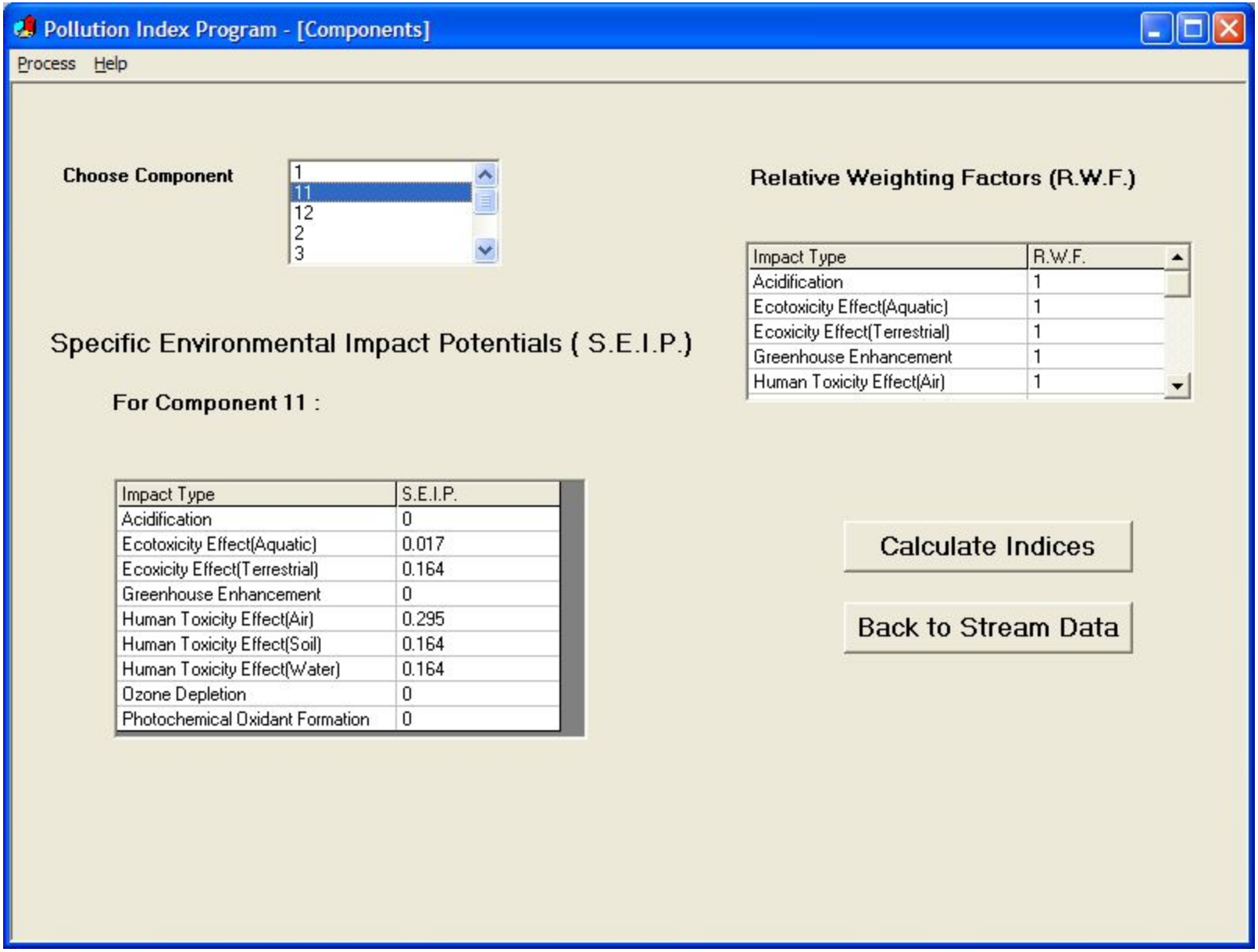
Search: Variables

Show: data only for the current stream / all data

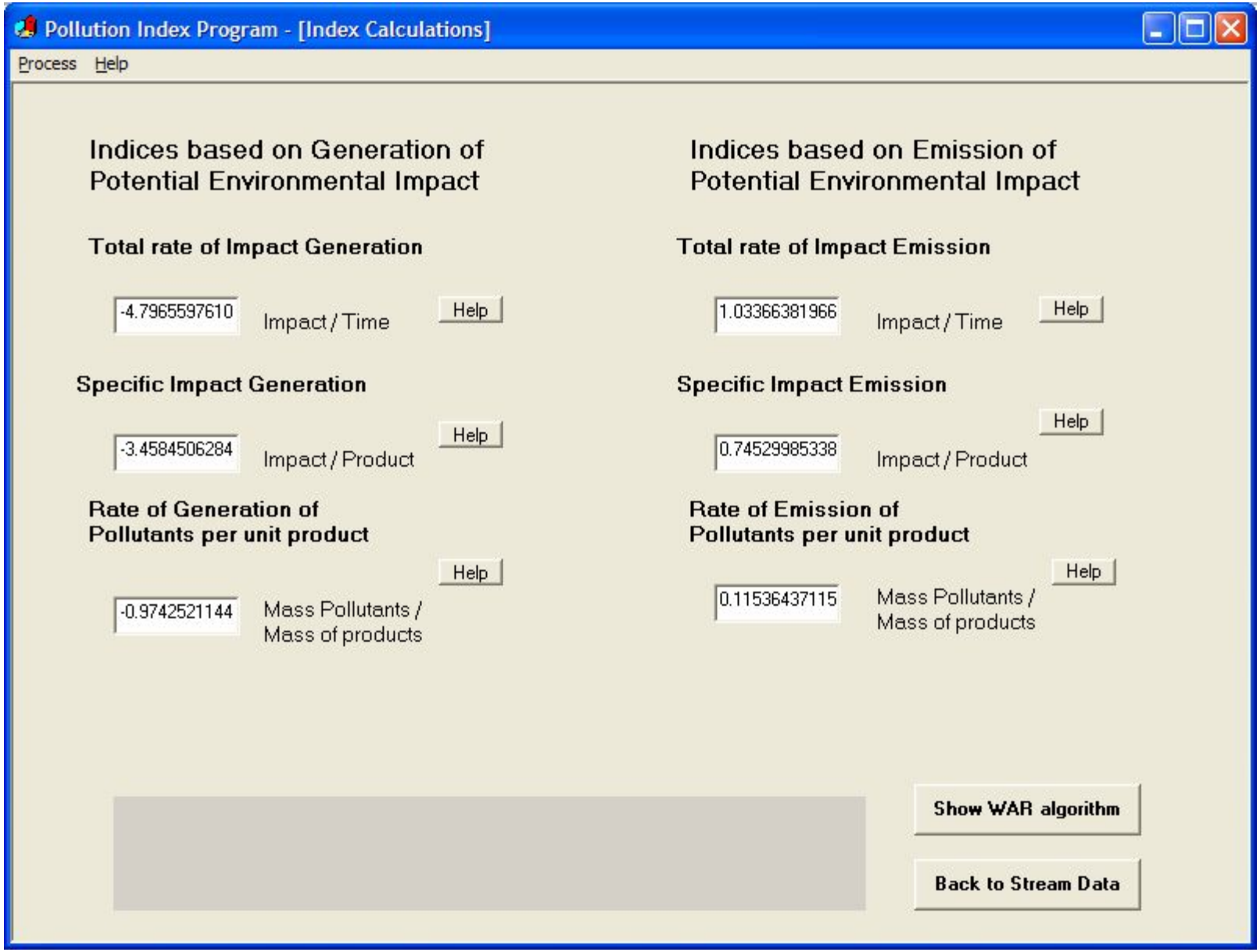
Load Data into Total Flow rate for stream

Load Data into Mass/Mole Fraction for Component

Використання WAR в Advanced Process Analysis System



Використання WAR в Advanced Process Analysis System



Використання WAR в Advanced Process Analysis System

Pollution Index Program

Process Help

Waste Reduction Algorithm

The Pollution Index of a stream is a measure of its potential environmental impact.

Stream name	Pollution Index
AC02	0.808175705812
AC45	1.03366381966
C320	0
C328	0
c407	0
C413	0

Note: All product streams have a pollution index of zero.

The Waste Reduction Algorithm:

Identify the streams with high pollution index.

Identify the process units from which these streams originate.

Carry out sensitivity analysis i.e. determine the variables which significantly affect the performance characteristics of that process unit.

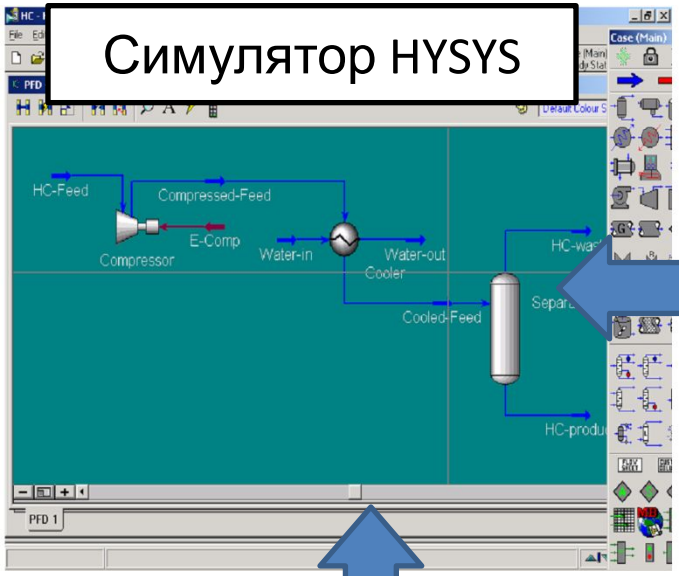
Manipulate these variables to minimize the pollution index values. This is a nonlinear optimization problem.

Apply any heuristic rules if necessary to solve the waste minimization problem.

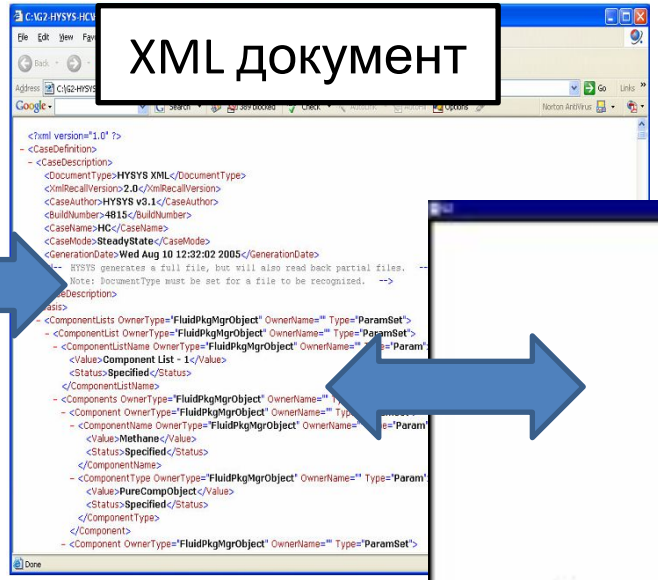
Back

Використання WAR в HYSYS 2006 + gPROMS + ENVOPExpert

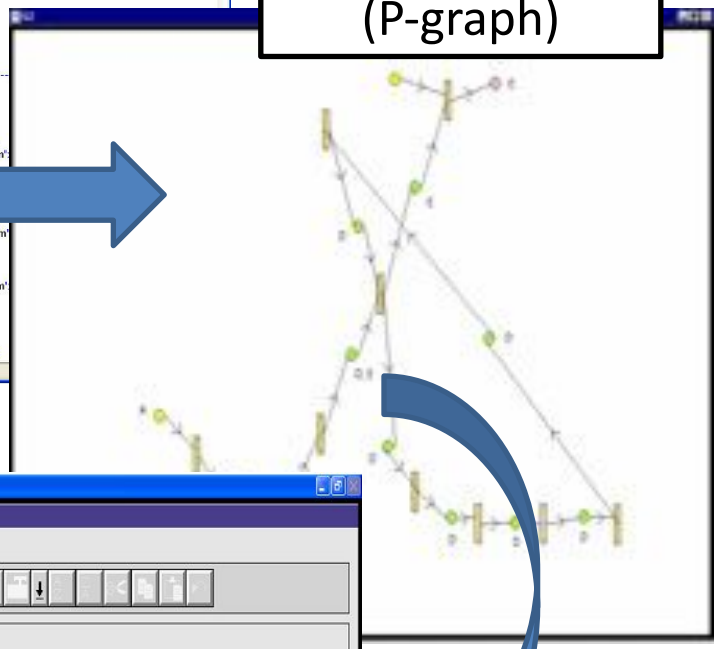
Симулятор HYSYS

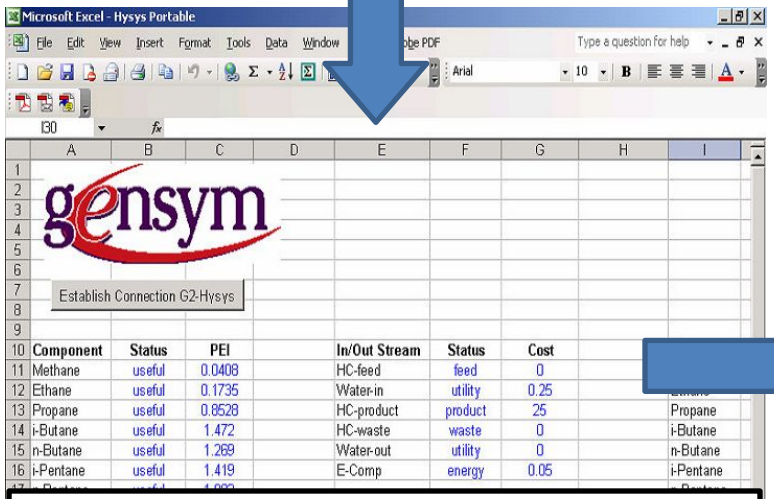


XML документ

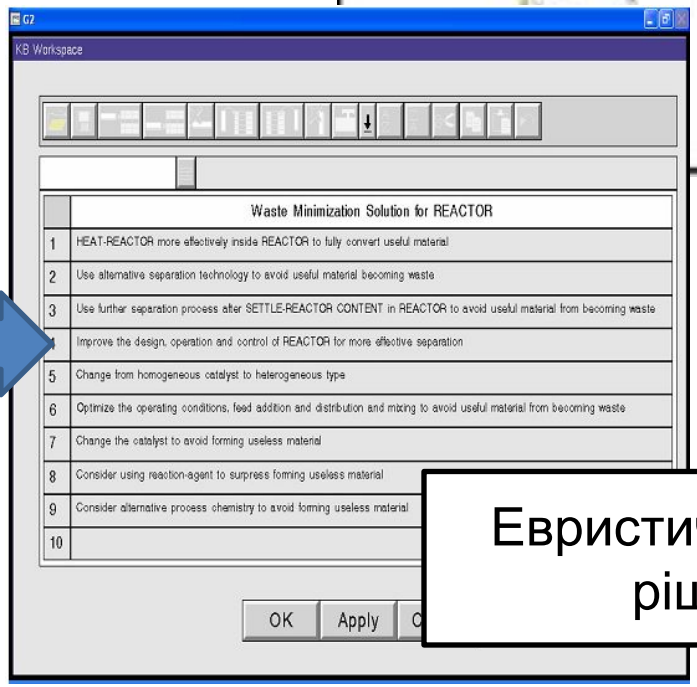


Process graph (P-graph)





Матеріальні потоки, їх склад, вартість та вплив на навколишнє середовище



Евристичний пошук рішення

Евристичний пошук рішення

- Логічні (якщо-то (if-then)) правила для мінімізації шкідливих викидів під час виробництва.

IF (джерело)	THEN (рішення)
Корисні речовини в потоці відходів	Повторна переробка/рециркуляція
Непотрібні речовини у вхідному потоці	Очищення
Корисні речовини з низьким ступенем регенерації	Збільшення реакції перетворення
Вироблений продукт являється непотрібним	Встановлення оптимальних умов реакції або зміна хімічного процесу
Потрібні речовини у вхідному потоці введення	Зменшення подачі сировини
Неефективний процес розділення	Покращення умов поділу

- Пошук рішення може бути зведений до рівня змінних, які використовуються в програмі-симуляторі

ВИСНОВКИ

- Розглянута можливість використання основних симуляторів для оцінювання сталості ХТС;
- Для оцінювання сталості використовуються індекси за EPA (Агентство охорони навколишнього середовища США) та алгоритм **WAR (Waste Reduction algorythm)**;

Дякую за увагу!