

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 показником 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 ґрунту	LD50
Глобальний вплив на атмосферу	Глобальне потепління	GWP
	Виснаження озонового шару	ODP
Регіональний атмосферний вплив	Кислотні дощі	AP
	Формування смогу	PCOP

OSHA – допустимі межі впливу, встановлені Міністерством охорони здоров'я США.

Математична модель WAR

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

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

The screenshot displays the COFE software interface with a process flowsheet and a 'Select Add-in' dialog box. The dialog box is open, showing a list of add-ins: 'Mixers & Splitters', 'TERNYP: Ternary Plugin', and 'WAR Add-In'. The 'WAR Add-In' is selected, and the 'Select' button is circled in red. A red arrow points to the 'WAR Add-In' entry. The flowsheet includes components like 'Feed pump', 'Reactor quench', 'Main HEX', 'Flash cooler', 'Flash', 'Demethanizer', and 'Toluene recovery'. A data table is located at the bottom of the interface.

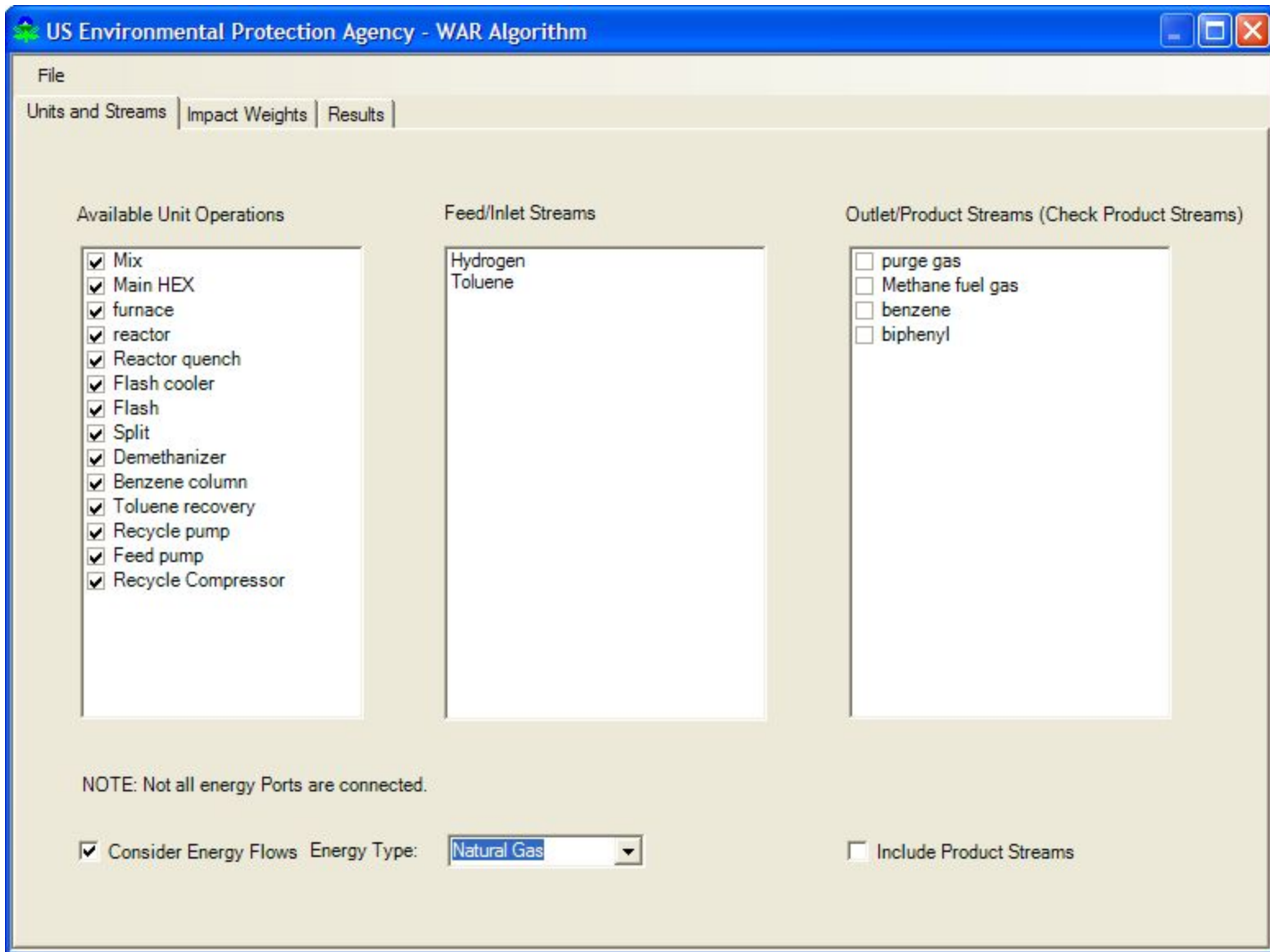
Stream	Hydrogen	Toluene	purge gas	Methane fuel gas	benzene	biphenyl	Unit
Pressure	38.3	1	32.8	10	1	1	bar
Temperature	38	25	38	38.6688	79.7269	241.369	°C
Flow rate	909.978	15387.5	3287.95	196.091	12392.5	421.018	kg / h
Mass frac Hydrogen	0.7	0	0.0926999	0.00832077	0	0	
Mass frac Methane	0.3	0	0.844697	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	

Restoring flowsheet from file
Loaded HDA.fsd

Log Solved, 6 warnings

Load a new Add-in

Використання WAR в COFE



Використання WAR в COFE

US Environmental Protection Agency - WAR Algorithm

File | Units and Streams | **Impact Weights** | Results

Impact Category	User Assigned Weight
Human Toxicity: Ingestion	1.0
Human Toxicity: Dermal/Inhalation	1.0
Aquatic Toxicity	1.0
Terrestrial Toxicity	1.0
Global Warming	1.0
Ozone depletion	1.0
Photochemical Oxidation	1.0
Acidification	1.0

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

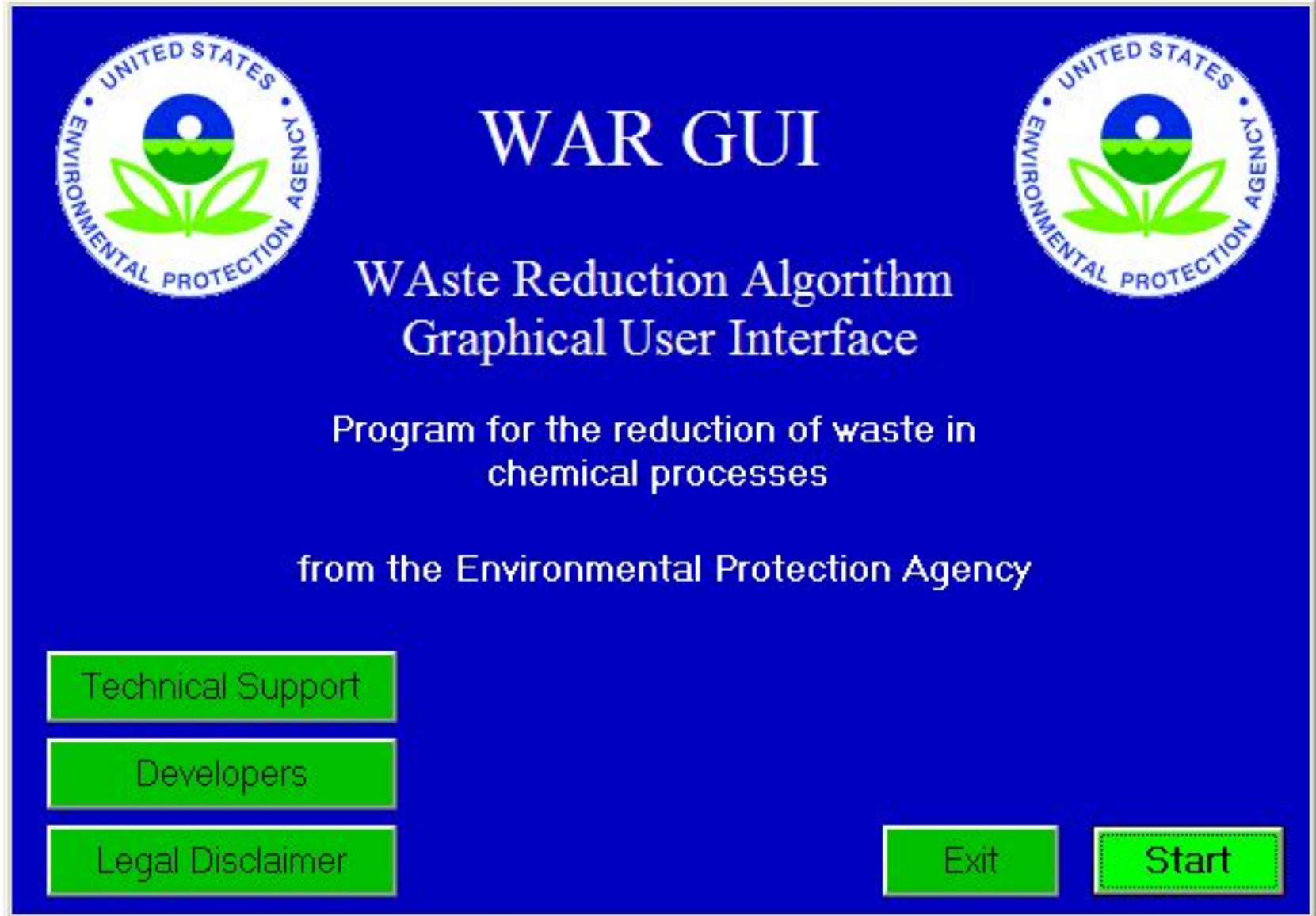
Total PEI generated within a system per mass of products (PEI/kg product)

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

The screenshot displays the WAR 1.0 software interface. The window title is "WAR 1.0" and the menu bar includes "File", "Options", and "Help". The main area is titled "Main screen" and features the EPA logo (United States Environmental Protection Agency) in the top right corner. The interface is organized into six steps, each with corresponding buttons:

- Step 1: Create new case history file or load saved case history file**
 - New case history file (dotted border)
 - Load case history file (highlighted in green)
 - ?
- Step 2: Add new case study or import a case study from ASPEN report file**
 - New Case Study
 - Import case study from ASPEN file
- Step 3: Edit/view case information (Optional)**
 - Edit Cases
- Step 4: Edit/View Weighting Profile**
 - View/Edit Weights
- Step 5: View Results**
 - View Results Graph
 - View Results Table
 - View Energy Comparison Graph
- Step 6: Create and view results file**
 - Create Results File
 - View Results File
 - Exit WAR

The number 11 is displayed in the bottom right corner of the interface.

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

 United States Environmental Protection Agency

Delete chemical Cancel Finish

12

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

Name

Assign ASPEN ID to highlighted chemical in list above



United States Environmental Protection Agency


13

Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR

File Help

Add from user data screen



Chemical Data

Name: CAS#:

Formula: Molecular weight: gm/mol

Impact category data

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

Calculate Scores

Cancel

Add

14

Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR

File Help

Impact weights screen

Potential Environmental Impact (Impact/kg)	User Assigned Weight	low	high
Human Toxicity: Ingestion	1		
Human Toxicity: Dermal/Inhalation	1		
Aquatic Toxicity	1		
Terrestrial Toxicity	1		
Global Warming	1		
Ozone depletion	1		
Photochemical Oxidation	1		
Acidification	1		

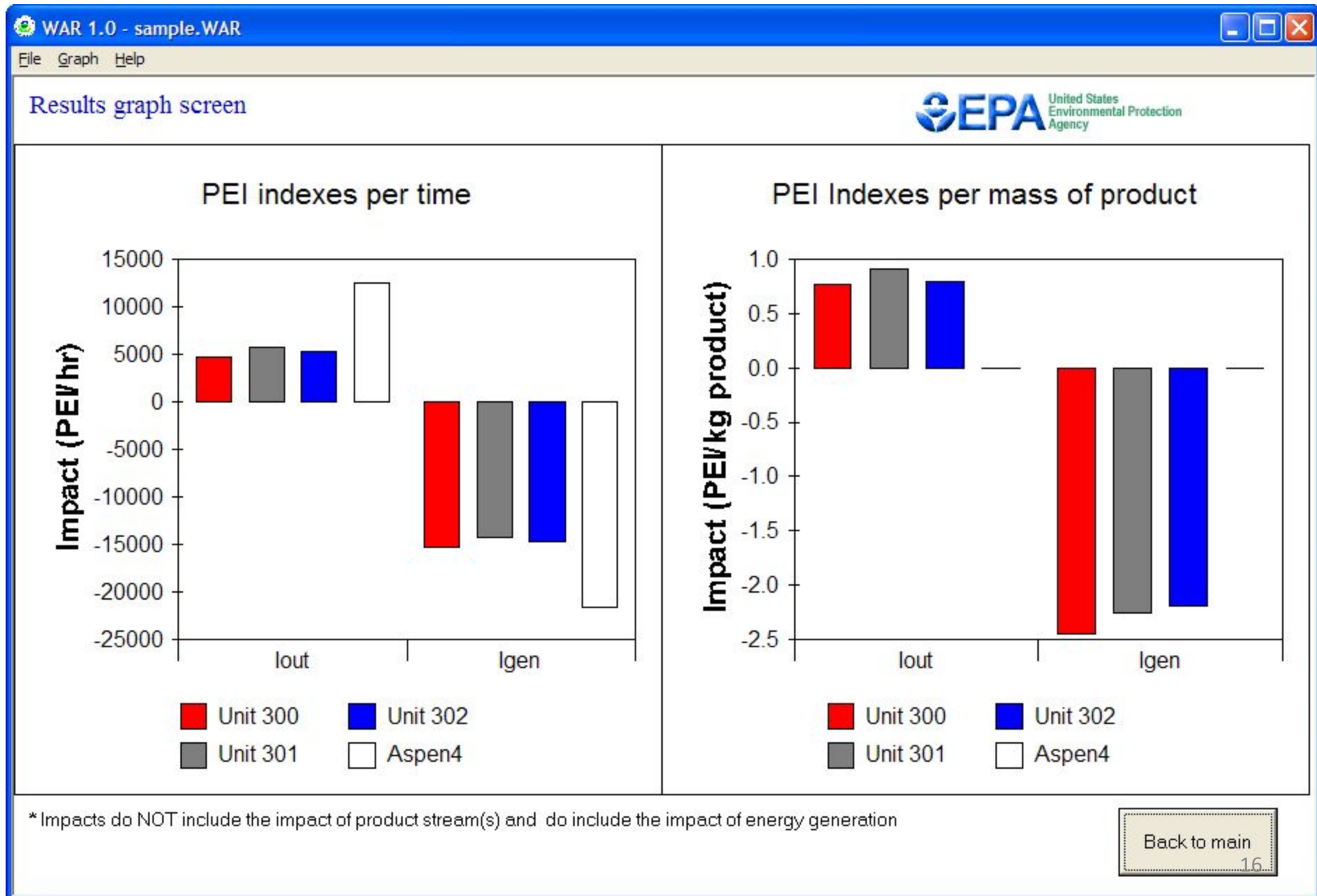
Default Values

Cancel

OK

The screenshot shows a software window titled 'WAR 1.0 - sample.WAR' with a menu bar containing 'File' and 'Help'. The main area is titled 'Impact weights screen' and is divided into two columns: 'Potential Environmental Impact (Impact/kg)' and 'User Assigned Weight'. The first column lists eight impact categories: Human Toxicity: Ingestion, Human Toxicity: Dermal/Inhalation, Aquatic Toxicity, Terrestrial Toxicity, Global Warming, Ozone depletion, Photochemical Oxidation, and Acidification. Each category has a small box containing the number '1'. The second column, labeled 'User Assigned Weight', features a horizontal slider for each category, with 'low' on the left and 'high' on the right. The sliders are currently positioned at the 'low' end. On the right side of the window, there are three buttons: 'Default Values', 'Cancel', and 'OK'. At the bottom left, the EPA logo is displayed with the text 'United States Environmental Protection Agency'. The page number '15' is located at the bottom right.

Використання WAR GUI



Використання WAR GUI

WAR 1.0 - sample.WAR

File Table Help

Results table screen



Total PEI indexes*

Case	lout PEI/hr	lout PEI/kg	lgen PEI/hr	lgen PEI/kg	lenergy PEI/kg	lenergy 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	HIPE	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)

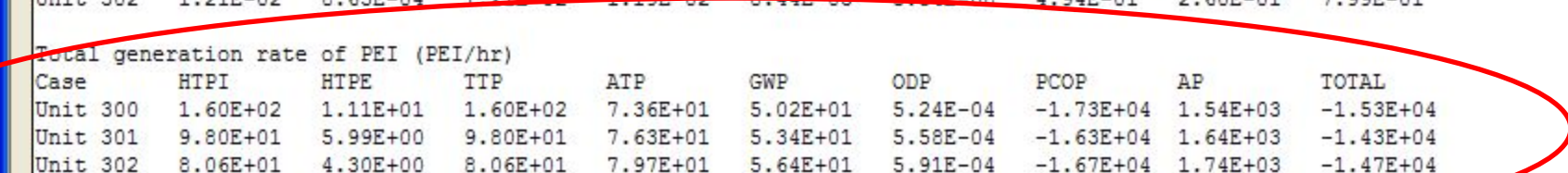
Case	HTPI	HIPE	TTP	ATP	GWP	ODP	PCOP	AP	TOTAL
Unit 300	2.57E-02	2.02E-03	2.57E-02	1.18E-02	8.05E-03	8.40E-08	4.44E-01	2.47E-01	7.65E-01
Unit 301	1.55E-02	1.18E-03	1.55E-02	1.21E-02	8.44E-03	8.83E-08	5.94E-01	2.60E-01	9.07E-01
Unit 302	1.21E-02	8.65E-04	1.21E-02	1.19E-02	8.44E-03	8.84E-08	4.94E-01	2.60E-01	7.99E-01

Total generation rate of PEI (PEI/hr)

Case	HTPI	HIPE	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	HIPE	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

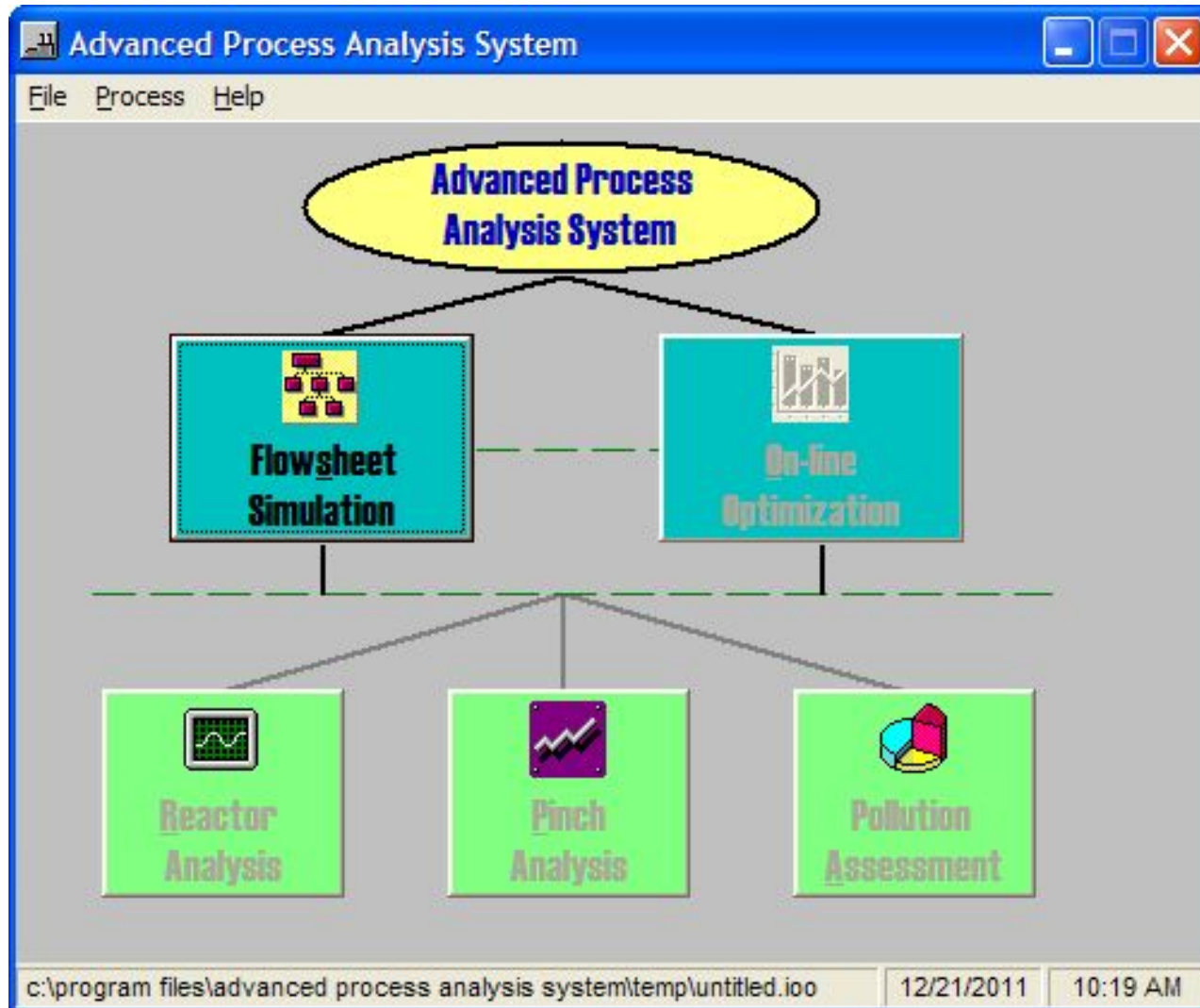


EPA United States Environmental Protection Agency

Close

18

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:

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:

Stream Type:

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 =

Search:

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

Proceed

Використання WAR в Advanced Process Analysis System

Pollution Index Program - [Components]

Process Help

Choose Component

- 1
- 11
- 12
- 2
- 3

Relative Weighting Factors (R.W.F.)

Impact Type	R.W.F.
Acidification	1
Ecotoxicity Effect(Aquatic)	1
Ecotoxicity Effect(Terrestrial)	1
Greenhouse Enhancement	1
Human Toxicity Effect(Air)	1

Specific Environmental Impact Potentials (S.E.I.P.)

For Component 11 :

Impact Type	S.E.I.P.
Acidification	0
Ecotoxicity Effect(Aquatic)	0.017
Ecotoxicity Effect(Terrestrial)	0.164
Greenhouse Enhancement	0
Human Toxicity Effect(Air)	0.295
Human Toxicity Effect(Soil)	0.164
Human Toxicity Effect(Water)	0.164
Ozone Depletion	0
Photochemical Oxidant Formation	0

Calculate Indices

Back to Stream Data

Використання WAR в Advanced Process Analysis System

Pollution Index Program - [Index Calculations]

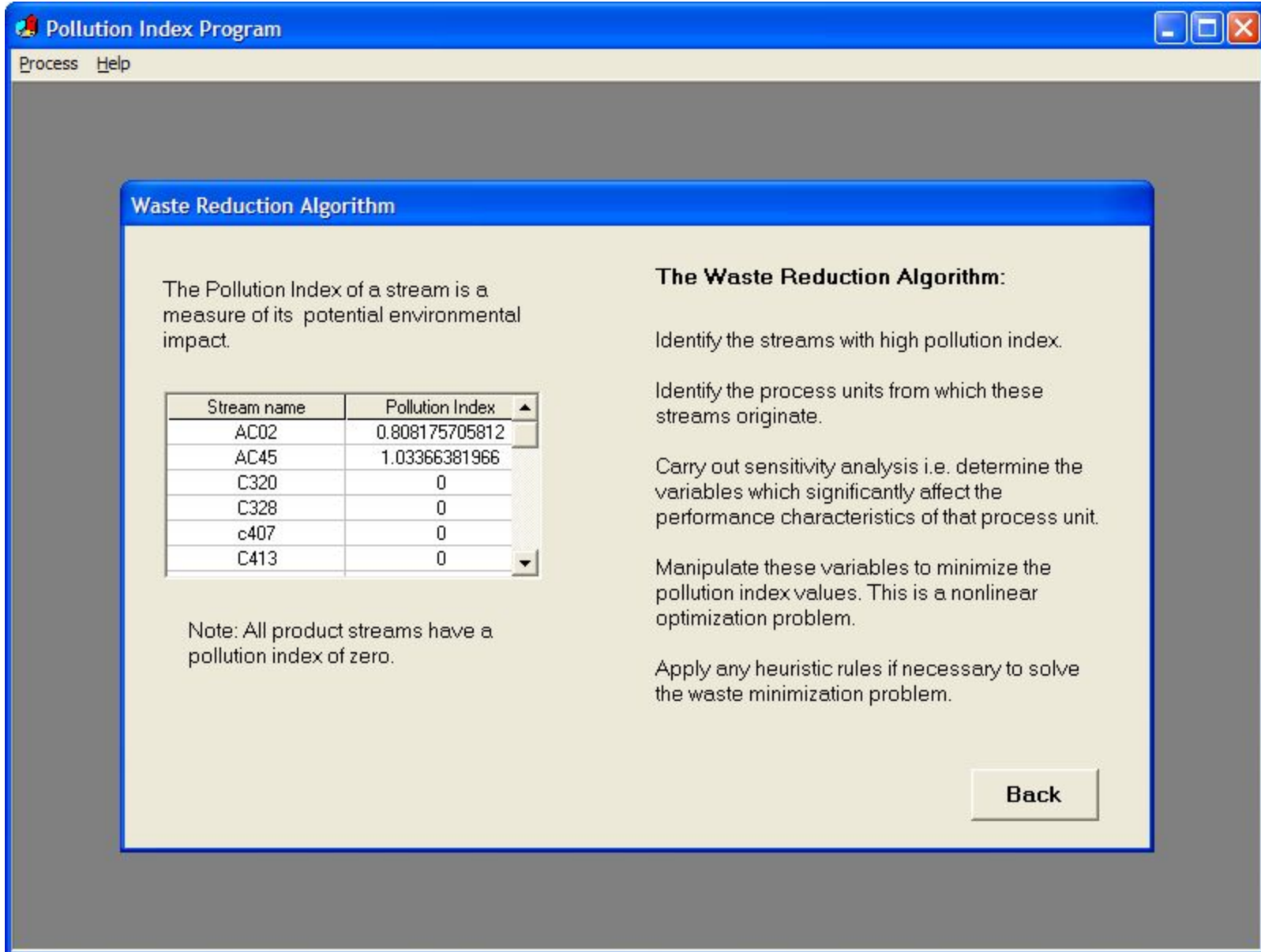
Process Help

Indices based on Generation of Potential Environmental Impact	Indices based on Emission of Potential Environmental Impact
Total rate of Impact Generation -4.7965597610 Impact / Time Help	Total rate of Impact Emission 1.03366381966 Impact / Time Help
Specific Impact Generation -3.4584506284 Impact / Product Help	Specific Impact Emission 0.74529985338 Impact / Product Help
Rate of Generation of Pollutants per unit product -0.9742521144 Mass Pollutants / Mass of products Help	Rate of Emission of Pollutants per unit product 0.11536437115 Mass Pollutants / Mass of products Help

Show WAR algorithm

Back to Stream Data

Використання WAR в Advanced Process Analysis System



The screenshot shows a window titled "Pollution Index Program" with a menu bar containing "Process" and "Help". The main content area is titled "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.

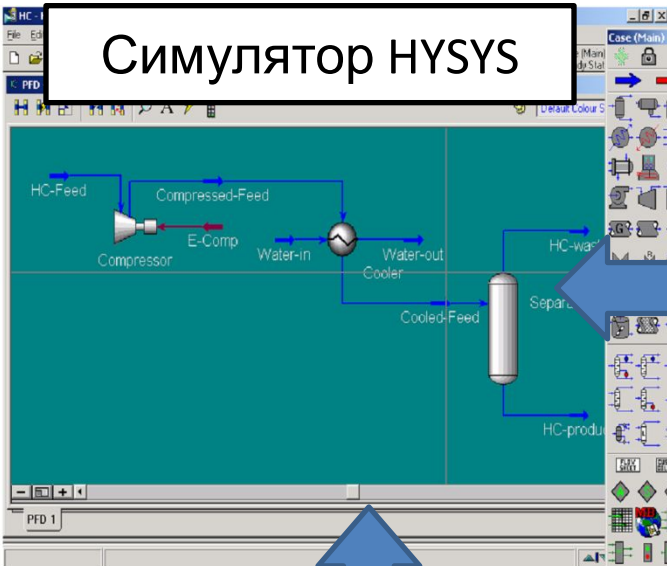
[Back](#)

Використання WAR в HYSYS 2006 + gPROMS + ENVOPEExpert

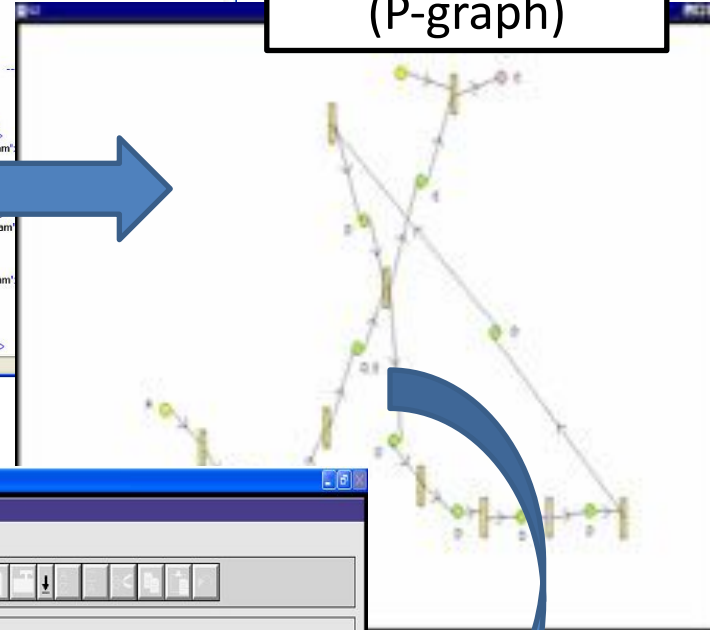
Симулятор HYSYS

XML документ

Process graph
(P-graph)



```
<?xml version="1.0" ?>
- CaseDefinition:
  - CaseDescription:
    - DocumentType: HYSYS XML</DocumentType>
    - XmlRecallVersion: 2.0</XmlRecallVersion>
    - CaseAuthor: HYSYS v9.1</CaseAuthor>
    - BuildNumber: 4815</BuildNumber>
    - CaseName: HC</CaseName>
    - CaseMode: SteadyState</CaseMode>
    - GenerationDate: Wed Aug 10 12:32:02 2005</GenerationDate>
    - HYSYS generates a full file, but will also read back partial files.
    - Note: DocumentType must be set for a file to be recognized. -->
  - Description:
  - ABIES:
    - ComponentLists OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
    - ComponentList OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
      - ComponentListName OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
        - Value ComponentList = 1</Value>
        - Status Specified</Status>
      - ComponentListName
    - Components OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
      - Component OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
        - ComponentName OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
          - Value Methane</Value>
          - Status Specified</Status>
        - ComponentName
      - ComponentType OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet"
        - Value PureCompObject</Value>
        - Status Specified</Status>
      - ComponentType
    - Component OwnerType="FluidPkgMgrObject" OwnerName="" Type="ParamSet">
```



Microsoft Excel - Hysys Portable

gensym

Establish Connection G2-Hysys

Component	Status	PEI	In/Out Stream	Status	Cost
11 Methane	useful	0.0408	HC-feed	feed	0
12 Ethane	useful	0.1735	Water-in	utility	0.25
13 Propane	useful	0.8528	HC-product	product	25
14 i-Butane	useful	1.472	HC-waste	waste	0
15 n-Butane	useful	1.269	Water-out	utility	0
16 i-Pentane	useful	1.419	E-Comp	energy	0.05

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

KB Workspace

Waste Minimization Solution for REACTOR

- HEAT-REACTOR more effectively inside REACTOR to fully convert useful material
- Use alternative separation technology to avoid useful material becoming waste
- Use further separation process after SETTLE-REACTOR CONTENT in REACTOR to avoid useful material from becoming waste
- Improve the design, operation and control of REACTOR for more effective separation
- Change from homogeneous catalyst to heterogeneous type
- Optimize the operating conditions, feed addition and distribution and mixing to avoid useful material from becoming waste
- Change the catalyst to avoid forming useless material
- Consider using reaction-agent to suppress forming useless material
- Consider alternative process chemistry to avoid forming useless material
-
-

OK Apply

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 реалізації	Докращення умов провіду

- Пошук рішення може бути введений до ривня зміни, як 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 alorythm)**;

Дякую за увагу!