

*Розглядається можливість рішення задачі скорочення забруднень на базі алгоритму мінімізації відходів WAR із використанням програм розрахунку матеріально-теплових балансів хіміко-технологічних процесів. Оцінено хімічний вплив виробництва метил етил кетону на навколишнє середовище*

*Ключові слова: мінімізація відходів, потенційний екологічний вплив, моделювання*

*Рассматривается возможность решения задачи сокращения загрязнений на базе алгоритма минимизации отходов WAR с использованием программ расчета материально-тепловых балансов химико-технологических процессов. Оценено химическое воздействие производства метил этил кетона на окружающую среду*

*Ключевые слова: минимизация отходов, потенциальное экологическое воздействие, моделирование*

*The possibility of solving the pollution reduction problem by means waste minimization algorithm WAR using the programs for the material and heat balances calculating of chemical technological processes is considered. The chemical impact of methyl ethyl ketone production on the environment was estimated*

*Keywords: waste minimization, potential environmental impact, modeling*

# ОЦІНЮВАННЯ ЕФЕКТИВНОСТІ СХЕМ ОТРИМАННЯ МЕТИЛ ЕТИЛ КЕТОНУ ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ АЛГОРИТМУ WAR

**Л. М. Бугаєва**

Кандидат технічних наук, доцент\*

Контактний тел.: 067-315-73-74

E-mail: bugaeva\_l@ukr.net

**А. С. Задорожний\***

Контактний тел.: 093-762-74-77

E-mail: a.zadorozhnyi@gmail.com

\*Кафедра кібернетики хіміко-технологічних процесів

Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут»

пр. Перемоги, 37, м. Київ, Україна, 03056

## 1. Вступ

Парадигма сталого розвитку (СР), сформульована спочатку на глобальному рівні, набуває все більш конкретних втілень на різних ієрархічних рівнях. Можна бачити розробки, де розглядається СР регіонів, міст, окремих підприємств. При оцінюванні екологічної складової будь-якого показника СР, використовуються дані моніторингу та статистичні дані. Для України це, в першу чергу, дані екологічних паспортів. Загальною проблемою при обчисленні більшості показників СР є нестача даних. Тому використання більшої кількості джерел даних значно підвищило якість оцінок СР. Знаходження таких джерел даних та їх ефективне використання при оцінюванні СР безумовно є актуальною задачею. В нашій роботі розглядається можливість використання даних, що надають моделюючі програми при розрахунку матеріальних балансів (МБ) хіміко-технологічних схем (ХТС). Ці дані можуть бути використані при оцінюванні індексів хімічних впливів ХТС на навколишнє середовище. Мінімізація цих впливів може забезпечити більш екологічні «зелені» виробництва й таким чином сприятиме СР цих виробництв.

## 2. Постановка задачі

Оскільки моделюючі програми широко застосовуються при розробці хімічних виробництв, можливість рішення задачі скорочення забруднень за допомогою таких програм має велике значення. Традиційний підхід до мінімізації відходів потребує постановки відповідної задачі оптимізації, рішення якої дозволить

знайти найкращу комбінацію технологічних умов процесу або оптимальну структуру ХТС. Розроблено цілий ряд методів рішення цієї задачі, але оптимізація ХТС задача зазвичай багатокритеріальна й містить як неперервні, так й дискретні параметри, що значно ускладнює можливість її рішення.

В роботі пропонується використовувати підхід, що базується на результатах розрахунків матеріальних балансів в моделюючих програмах типу Cofe, ChemCad, Hysys та ін. Як метод рішення задачі мінімізації відходів розглядався розроблений у Національній лабораторії управління ризиками США алгоритм скорочення викидів WAR(waste algorithm reduction) [1].

В рамках дослідження були поставлені такі задачі:

- Побудувати процедуру рішення задачі мінімізації відходів на базі алгоритму скорочення викидів WAR.
- Виконати розрахунок матеріальних балансів складних ХТС із використанням наявних сучасних моделюючих програм.
- Використати отримані результати розрахунку МБ ХТС та алгоритм WAR для оцінювання потенційних екологічних впливів ХТС на навколишнє середовище.
- Провести модифікацію варіантів ХТС, з метою пошуку варіанта, що забезпечує кращий рівень показників СР.

## 3. Методика рішення задачі мінімізації відходів та визначення індексів впливів в алгоритмі WAR

Суттєвим моментом проведених досліджень є те, що інформація для прийняття рішень в основному має отримуватись на основі програмної реалізації моделі

ХТС, яка дозволяє проводити розрахунки варіантів ХТС в сучасних моделюючих програмах, таких як Aspen Plus, Hysys, PRO/II, ChemCad та COFE [1, 2]. Ці програми дозволяють не тільки розраховувати матеріальні й теплові баланси складних ХТС, але й проводити оцінку їх технологічної та економічної ефективності, а також за допомогою відповідних вбудованих засобів, таких як WAR, вирішувати проблему мінімізації відходів.

Алгоритм WAR заснований на понятті потенційного впливу хімічних процесів на навколишнє середовище. Було введено шість екологічних індексів впливу, які характеризують потенційний вплив процесу. Індеси кількісно відображають можливі впливи, оцінюючи та порівнюючи які, можна вносити зміни у технологічні схеми для зниження рівня забруднення. Потенційний вплив на навколишнє середовище визначається з урахуванням масових витрат потоків, складів та відносної шкали потенційного екологічного впливу для кожної хімічної речовини. Оцінки хімічного впливу враховують вісім категорій ефектів від руйнування озонового шару до впливу токсичності на людей та навколишнє середовище.

Запропонований в роботі [1] підхід розглядає крім рівнянь масових балансів, ще й рівняння збереження потенційного впливу на оточуюче середовище, яке має вигляд:

$$\frac{dI_{syst}}{dt} = I_{in} - I_{out} + I_{gen} \quad (1)$$

Де  $I_{syst}$  відображає потенційний екологічний вплив всередині процесу,  $I_{in}$  показує ступень потенційного впливу на вході:

$$I_{in} = \sum_i^{EnvCat} \sum_j^{InletStreams} \sum_k^{Component} \alpha_i M_j^{(in)} x_{k,j} \Psi_{k,j}^s \quad (2)$$

Відповідно  $I_{out}$  - це ступень потенційного впливу на виході:

$$I_{out} = \sum_i^{EnvCat} \sum_j^{OutletStreams} \sum_k^{Component} \alpha_i M_j^{(out)} x_{k,j} \Psi_{k,j}^s \quad (3)$$

У виразах (2, 3) використовуються наступні позначення:

$M_j$  - масова витрата j-го потоку,

$x_{k,j}$  - масова доля k-ої речовини в j-ому потоці,

$\Psi_{k,j}$  – потенціал впливу на навколишнє середовище k-ої хімічної речовини.

Алгоритм WAR для обчислення загального потенціал впливу  $\Psi_j$  використовує вираз

$$\Psi_j = \sum_l \alpha_l \Psi_{jl}^s$$

Сума береться по категоріях потенційного хімічного впливу на навколишнє середовище l, наприклад, потенціал руйнування озону, здоров'я людини та ін. Тут  $\alpha_l$  відносний ваговий коефіцієнт впливу l-го типу, незалежно від речовини j, а  $\Psi_{jl}^s$  конкретний потенційний вплив на навколишнє середовище хімічної речовини j для впливу l-го типу.

Як продемонстровано в ряді робіт [1, 2], алгоритм WAR може бути дуже корисним при оцінюванні варіантів схем і виборі такого варіанта ХТС, який дає мінімальну кількість викидів та характеризується найменшим впливом на навколишнє середовище. Саме від

обраного проектного варіанту залежить якість роботи хіміко-технологічної схеми на стадії експлуатації.

#### 4. Моделювання та оцінювання впливів виробництва метил етил кетону з вторинного бутилового спирту

В представленій роботі алгоритм WAR був застосований до вибору варіанта схеми виробництва метил етил кетону (МЕК) з вторинного бутилового спирту (SBA). На рис. 1 показано базову схему процесу виробництва метил етил кетону.

Бутиловий спирт подається в скруббер, де він забирає надлишковий метил етил кетон з потоку водню. Після цього в потоці вторинного бутилового спирту за допомогою насоса встановлюють робочий тиск та за допомогою теплообмінників – робочу температуру. Нагрітий вторинний бутиловий спирт подається в реактор, де відбуваються хімічні перетворення. Вихідна суміш із реактора подається в теплообмінник, де вона частково конденсується. Суміш МЕК, водню та бутилового спирту, що не прореагував, в подальшому охолоджуються та надходять в сепаратор, де водень випаровується шляхом пониження тиску. Після цього водень видаляють та рідка фаза подається в ректифікаційну колону. Масові потоки та склади потоків були розраховані за допомогою програми ChemCad 6.3.

Оцінка базової схеми показала, що в потоці під номером 13 міститься велика кількість вторинного бутилового спирту, що не прореагував, та мала кількість МЕК. Для початку введення методики по мінімізації відходів, логічно було б спробувати відновити вторинний бутиловий спирт та МЕК. Саме тому, ХТС процесу необхідно змінити введенням рециркулю потоку №13 (рис. 2). Розглядалася ступінь повторного використання 50% потоку №13.

Модифікація процесу збільшила кількість продукту приблизно на 73%, шляхом зменшення кількості відходів вторинного бутилового спирту в потоці №18 на 20%.

Для кожного варіанту схеми (базовий і модифікований) було розраховано шість різних індексів впливу на навколишнє середовище. В табл. 1 наведено основні розраховані індекси впливу на навколишнє середовище.

Таблиця 1

Основні індекси впливу на навколишнє середовище

	$\hat{I}_{gen}^{NP}$ , впл/кг * * 10	$\Gamma_{out}^{NP}$ , впл/ГОД * * 1000	$\hat{I}_{out}^{NP}$ , впл/кг * * 100	$\hat{M}_{out}^{NP}$ , кг/кг * * 100
Модифікована 50%	120,00	353,00	367,00	250,00
Базова схема	128,00	409,00	718,00	491,00

$\hat{I}_{gen}^{NP}$  – утворення питомого потенційного впливу на навколишнє середовище із відходів виробництва, впл/кг,  $\Gamma_{out}^{NP}$  – швидкість утворення потенційного впливу на навколишнє середовище із-за відходів виробництва, впл/год,  $\hat{I}_{out}^{NP}$  – викид питомого потенційного впливу на навколишнє середовище із-за відходів виробництва, впл/кг,  $\hat{M}_{out}^{NP}$  – маса відходів від виробництва, кг відходів / кг продукту.

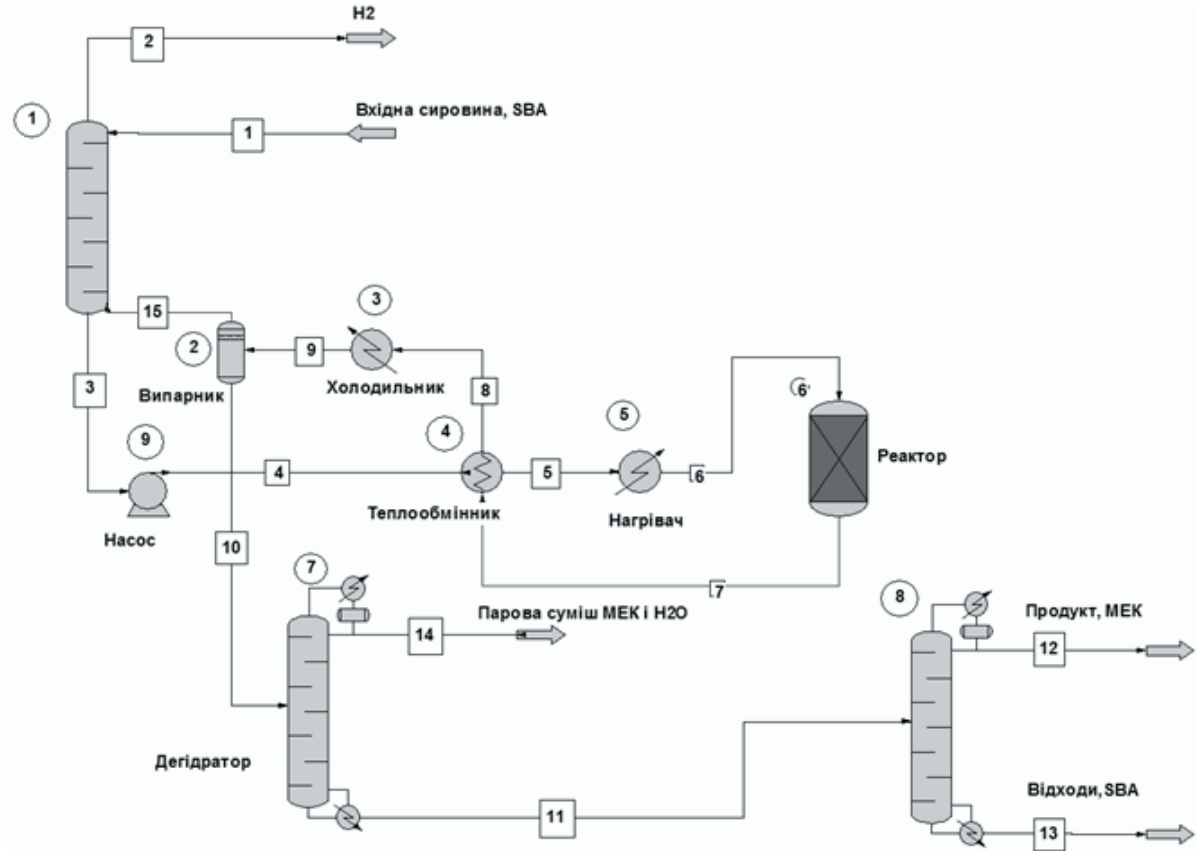


Рис. 1. Базова схема процесу виробництва метил етил кетону з вторинного бутилового спирту

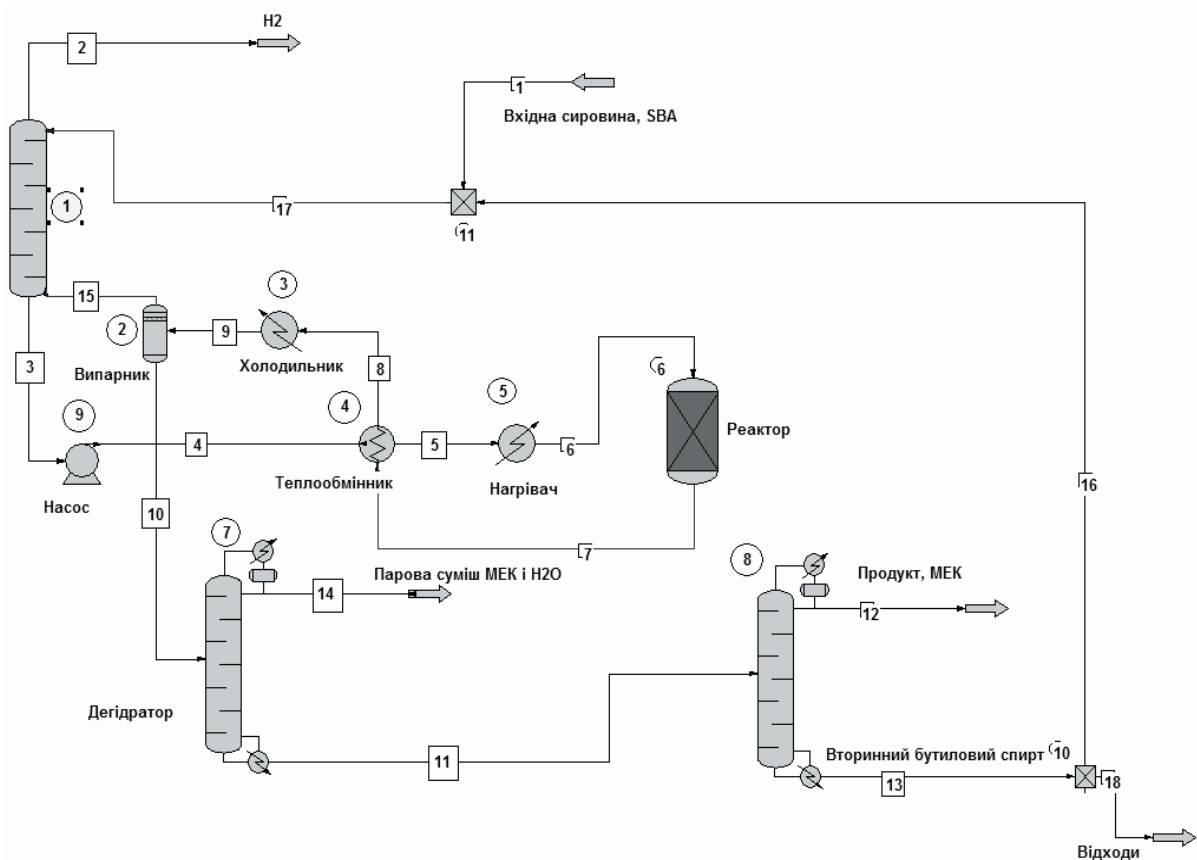


Рис. 2. Модифікована схема процесу виробництва метил етил кетону з 50% ступенем повторного використання

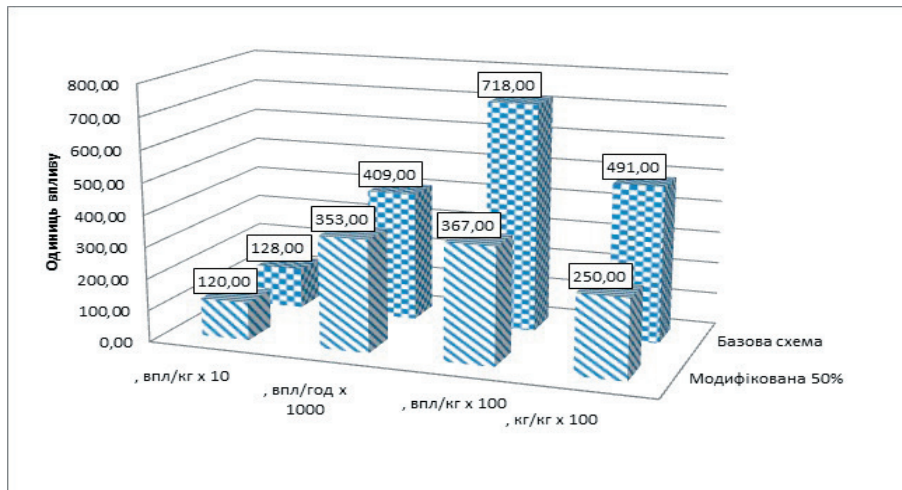


Рис. 3. Індекси впливу, який утворюється під час виробництва метил етил кетону з вторинного бутилового спирту

### 5. Аналіз результатів

Індекси впливу, який утворюється під час процесу на рис. 3 показує, що швидкість утворення впливу відходами зменшилась на 13% для 50% рециркулу.

Індекси впливу, які формуються на виході із системи показують, що:

- 1) Швидкість утворення впливу відходами знизилась на 11% для 50% рециркулу;
- 2) Вплив, який створюють відходи на кілограм продукту знизився на 48% для 50% повторного використання;
- 3) Вихід кілограму відходів на кілограм продукту знизився на 60% для 50% рециркулу.

Варто зазначити, що зниження рівня шкідливих викидів має місце за всіма індексами. Найбільш важливим індексом в даному випадку являється кількість шкідливих викидів на кілограм продукту. Зменшення цього індексу пов'язане зі зменшенням індексу утворення шкідливого впливу в масовому еквіваленті. Це зменшення також є віддзеркаленням збільшення продуктивності заводу в цілому.

Зменшення індексів є досить великим, що свідчить про значне зменшення рівня забруднення. Зменшення утворення впливу на навколишнє середовище на масу продукту (48-78%), означає, що модифікована

схема виробництва може задовольнити більш широкі потреби ринку, не збільшуючи масштаби виробництва й кількість шкідливих викидів у навколишнє середовище. Це також означає, що модифікована схема, що має вплив на 48-78% менше базового варіанту, може задовольнити потреби одного і того ж ринку, для якого була розроблена базова схема.

### 6. Висновки

В рамках представленої роботи було проведено комп'ютерне моделювання хіміко-технологічної схеми

отримання метил етил кетону. Розрахунок варіантів схеми був виконаний у відомій моделюючій програмі ChemCad.

Проводились розрахунки балансів для різних вхідних даних та керуючих параметрів, а також використовувались вбудовані в програму процедури аналізу можливих варіантів схем. Це допомогло знайти найкраще проектне рішення для процесу отримання метил етил кетону.

Нашою задачею було знайти варіант схеми із мінімальним впливом на оточуюче середовище. Для цього був застосований алгоритм мінімізації відходів WAR, який досить легко інтегрується із основною програмою розрахунку матеріальних балансів ChemCad. Алгоритм WAR дозволив отримати відносні значення впливів (рівня шкідливості) різних варіантів технологічних схем. Враховуючи сучасні виклики сталого розвитку, можна зробити висновок, що застосування алгоритму WAR разом із моделюючою програмою надає можливість оцінити й порівняти рівень сталості кожного із запропонованих проектних варіантів технологічної схеми.

По результатах такого аналізу за критерієм зменшення впливів, які пов'язані із мінімізацією відходів, був обраний найкращий варіант ХТС для виробництва метил етил кетону.

### Література

1. Hilaly, A.K., Sikdar, S.K. Pollution Balance: New Methodology for Minimizing Waste Production in Manufacturing Processes [Текст] / Hilaly, A.K., Sikdar, S.K. // J. Air and Waste Manage.Assoc. – 1994. -№44. - p.1303.
2. Cabezas, H., Bare, J. C., Mallick, S.K. Pollution Prevention with Chemical Process Simulators: the Generalized Waste Reduction (WAR) [Текст] / H.Cabezas, J. C.Bare, S.K.Mallick // Algorithm, Computers and Chemical Engineering. – 1997 - Vol. 21 - pp. S305-310.