

БАКАЛАВРСЬКА РОБОТА

БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ

Група АКП-21-1

Максим Єршов

2025

Міністерство освіти і науки України
Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу
Факультет автоматизації та енергетики
Кафедра автоматизації та комп'ютерно-інтегрованих технологій

Єршов Максим Ігорович

(прізвище, ім'я, по батькові)

УДК

681.5

(індекс)

БАКАЛАВРСЬКА РОБОТА

Розробка інтелектуальної системи керування процесом конденсації метану

(назва роботи)

Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології

(назва освітньої програми)

151 - Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології

(шифр і назва спеціальності)

Робота містить результати власних досліджень, використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

Нормоконтроль

доцент

(посада)

(підпис)

(дата)

О.В.Кучмистенко

(ініціали та прізвище)

Здобувач освітнього ступеня

АКП-21-1

(шифр групи)

(підпис)

(дата)

Є.І.Єршов

(ініціали та прізвище)

Рецензент

доцент

(посада)

(підпис)

(дата)

Л.Я.Чигур

(ініціали та прізвище)

Науковий керівник

доцент

(посада)

(підпис)

(дата)

В.С.Борин

(ініціали та прізвище)

Допущено до захисту

Завідувач кафедри

доцент

(посада)

(підпис)

(дата)

А.І. Лагойда

(ініціали та прізвище)

Івано-Франківськ - 2025

Івано-Франківський національний технічний університет нафти і газу

(повне найменування закладу вищої освіти)

Факультет автоматизації та енергетики

Кафедра автоматизації та комп'ютерно-інтегрованих технологій

Освітній рівень перший (бакалаврський)

Спеціальність 151 - Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології

(шифр і назва)

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри АКІТ.

_____ /Лагойда А.І./

«_____» _____ 2025 р

З А В Д А Н Н Я

НА БАКАЛАВРСЬКУ РОБОТУ СТУДЕНТОВІ

Єршову Максиму Ігоровичу

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи Розробка інтелектуальної системи керування процесом конденсації метану

керівник роботи Борин Василь Степанович, к.т.н., доцент

(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання)

затвержені наказом закладу вищої освіти від « 07 » травня 20 25 року № 52/8

2. Строк подання студентом роботи 13.06.2025 року

3. Вихідні дані до роботи Технологічний регламент, літературні джерела

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, які потрібно розробити) Вступ. Аналіз літературних джерел та опис процесу окислювальної конденсації метану. Вибір оптимального варіанту технологічної схеми процесу окислювальної конденсації метану на основі результатів комп'ютерного моделювання. Синтез системи автоматичного керування процесом окислювальної конденсації метану. Розробка інтелектуальної системи прийняття рішень

5. Перелік графічного матеріалу (з точним зазначенням обов'язкових креслень)

Лист 1 - Технологічна схема процесу - БР.АКП - 05.00.00.000 01

Лист 2 - Інформаційна схема про рециркуляційний потік №13 - БР.АКП - 05.00.00.000 02

Лист 3 - Структурна модель об'єкта управління в середовищі MATLAB - БР.АКП - 05.00.00.000 03

Лист 4 - Перехідна характеристика об'єкта управління - БР.АКП - 05.00.00.000 04

Лист 5 - Перехідні характеристики при різних параметрах ПІД-регулятора - БР.АКП - 05.00.00.000 05

Лист 6 - Вікно обчислення локальних пріоритетів критеріїв - БР.АКП - 05.00.00.000 05

6. Консультанти розділів роботи

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		завдання видав	завдання прийняв

7. Дата видачі завдання 06 листопада 2024 року

КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ з/п	Назва етапів бакалаврської роботи	Термін виконання етапів роботи	Примітка
1	Аналіз літературних джерел та опис процесу окислювальної конденсації метану	25 березня 2025	
2	Вибір оптимального варіанту технологічної схеми процесу окислювальної конденсації метану на основі результатів комп'ютерного моделювання	15 квітня 2025	
3	Синтез системи автоматичного керування процесом окислювальної конденсації метану	05 травня 2025	
4	Розробка інтелектуальної системи прийняття рішень	30 травня 2025	

Студент _____
(підпис)

Є.І.Єршов _____
(ініціали та прізвище)

Керівник роботи _____
(підпис)

В.С.Борин _____
(ініціали та прізвище)

АНОТАЦІЯ

У даній роботі проведено аналіз процесу окислювальної конденсації метану, розглянуто його технологічну схему, а також проаналізовано альтернативні методи отримання цільового продукту. Визначено ключові критерії, які слід враховувати при виборі каталізатора для забезпечення ефективності процесу.

Розроблено інтелектуальну систему керування процесом конденсації метану з метою підвищення ефективності та надійності технологічного процесу. Процес конденсації метану є важливою складовою в промислових системах зберігання та транспортування природного газу, зокрема у криогенних установках. Застосування сучасних методів штучного інтелекту, зокрема нейронних мереж та нечіткої логіки, дозволяє здійснювати адаптивне керування в умовах змінних параметрів середовища та технологічних коливань. Запропонована система враховує температурно-тискові залежності, характеристики охолодження та динаміку фазового переходу. Впровадження інтелектуального підходу сприяє зменшенню енергоспоживання, підвищенню стабільності процесу та забезпеченню безпеки експлуатації обладнання. Результати моделювання демонструють ефективність розробленої системи порівняно з традиційними методами автоматичного регулювання.

Ключові слова: інтелектуальна система керування, конденсація метану, штучний інтелект, моделювання процесів, каталізатор, автоматизація, фазовий перехід, хімічна технологія

ABSTRACT

This paper analyzes the process of oxidative condensation of methane, considers its technological scheme, and analyzes alternative methods for obtaining the target product. Key criteria that should be considered when choosing a catalyst to ensure the efficiency of the process are identified.

An intelligent methane condensation process control system has been developed to increase the efficiency and reliability of the technological process. The methane condensation process is an important component in industrial natural gas storage and transportation systems, in particular in cryogenic plants. The application of modern artificial intelligence methods, in particular neural networks and fuzzy logic, allows for adaptive control in conditions of variable environmental parameters and technological fluctuations. The proposed system takes into account temperature-pressure dependences, cooling characteristics and phase transition dynamics. The implementation of an intelligent approach contributes to reducing energy consumption, increasing process stability and ensuring the safety of equipment operation. The simulation results demonstrate the effectiveness of the developed system compared to traditional automatic control methods.

Keywords: intelligent control system, methane condensation, artificial intelligence, process modeling, catalyst, automation, phase transition, chemical technology

ЗМІСТ

	ст.
ВСТУП	9
1 АНАЛІЗ ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ ТА ОПИС ПРОЦЕСУ	
ОКИСЛЮВАЛЬНОЇ КОНДЕНСАЦІЇ МЕТАНУ	10
1.1 Аналіз літературних джерел по темі роботи.....	10
1.2. Опис процесу окислювальної конденсації метану.....	11
Висновки до розділу.....	12
2 ВИБІР ОПТИМАЛЬНОГО ВАРІАНТУ ТЕХНОЛОГІЧНОЇ СХЕМИ	
ПРОЦЕСУ ОКИСЛЮВАЛЬНОЇ КОНДЕНСАЦІЇ МЕТАНУ НА ОСНОВІ	
РЕЗУЛЬТАТІВ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ.....	
14	
2.1 Середовище ChemCAD як інструмент комп'ютерного моделювання процесу окислювальної конденсації метану.....	14
2.2 Розробка технологічної схеми процесу.....	17
2.3 Налаштування параметрів потоків і апаратів технологічної схеми.....	18
Висновок до розділу.....	24
3 СИНТЕЗ СИСТЕМИ АВТОМАТИЧНОГО КЕРУВАННЯ ПРОЦЕСОМ	
ОКИСЛЮВАЛЬНОЇ КОНДЕНСАЦІЇ МЕТАНУ	
25	
3.1 Моделювання процесу окислювальної конденсації метану.....	25
3.2 Розрахунок і вибір параметрів класичних регуляторів.....	30
Висновки до розділу.....	39
4 РОЗРОБКА ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ СИСТЕМИ ПРИЙНЯТТЯ	
РІШЕНЬ.....	
40	
4.1 Принципи побудови інтелектуальної СППР.....	40
4.2 Функціонування інтелектуальних компонентів.....	42

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ			
Змн.	Лист	№ докум.	Підпис	Дата				
Розроб.		Єршов Є.І.			Розробка інтелектуальної системи керування процесом конденсації метану Пояснювальна записка	Літ.	Арк.	Аркушів
Перевір.		Борин В.С.				6	66	
Реценз.		Чигур Л.Я.				ІФНТУНГ		
Н. Контр.		Кучмистенко О				АКП-21-1		
Затверд.		Лагойда А.І.						

4.3 Застосування методу аналізу ієрархій для вибору каталізатора.....	45
4.4 Програмне забезпечення для вибору каталізатора на основі методу аналізу ієрархій.....	47
Висновки до розділу.....	63
ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ.....	64
ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ НА ДЖЕРЕЛА.....	65

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		7

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ ТА УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ФСА - функціональна схема автоматизації

БЗ — база знань

ОК - об'єкт керування

ОКМ — окислювальна конденсація метану

CR — відношення узгодженості (*Consistency Ratio*)

ТЗА - технічні засоби автоматизації

РЗЕ — рідкісноземельні елементи

ПЗ - програмне забезпечення

CI — індекс узгодженості (*Consistency Index*)

ПО — проблемна область

СППР — система підтримки прийняття рішень

МАІ — метод аналізу ієрархій

БД — база даних

ОПР — особа, що приймає рішення

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		8

ВСТУП

У сучасній енергетиці природний газ, основним компонентом якого є метан, відіграє ключову роль як екологічно чисте та енергоефективне паливо. Застосування метану охоплює широкий спектр галузей – від теплоенергетики та хімічної промисловості до транспорту і житлово-комунального господарства. Однак для його ефективного зберігання, транспортування та використання необхідне приведення газу до належного фізико-хімічного стану. Одним із критичних етапів у технологічному ланцюгу підготовки газу є процес конденсації метану, який забезпечує перехід газоподібного палива в рідкий стан для подальшого зберігання чи транспортування, зокрема у вигляді зрідженого природного газу (ЗПГ).

Процес конденсації метану характеризується складною динамікою, оскільки супроводжується значними змінами температури, тиску, фазового стану речовини та теплових потоків. Ці фактори вимагають високого рівня точності керування та безперервного моніторингу параметрів технологічного процесу. У зв'язку з цим особливого значення набуває розробка ефективних систем автоматичного керування, здатних забезпечити стабільність процесу, своєчасне реагування на відхилення технологічних параметрів, оптимізацію енергоспоживання та мінімізацію втрат метану.

Автоматизована система керування процесом конденсації метану має відповідати сучасним вимогам до промислових систем: включати засоби збору, обробки та архівації даних, функції діагностики, прогнозування аварійних ситуацій, а також мати зручний операторський інтерфейс. Інтеграція інтелектуальних алгоритмів регулювання, використання сучасних засобів вимірювання та програмно-апаратного забезпечення відкривають нові можливості для підвищення ефективності управління цим процесом.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		9

1 АНАЛІЗ ЛІТЕРАТУРНИХ ДЖЕРЕЛ ТА ОПИС ПРОЦЕСУ ОКИСЛЮВАЛЬНОЇ КОНДЕНСАЦІЇ МЕТАНУ

1.1 Аналіз літературних джерел по темі роботи

На сучасному етапі розвитку енергетичної галузі природний газ переважно використовується як ефективне джерело теплової та електричної енергії. Газові теплові електростанції характеризуються відносно низьким рівнем викидів шкідливих речовин, що зумовлює їхню екологічну привабливість порівняно з іншими видами теплогенеруючих установок. Пропан-бутанова фракція знаходить широке застосування як паливо для побутових потреб, а також як моторне пальне для автотранспортних засобів. У промисловості газ-метан використовується в обмежених обсягах, в багатьох випадках як відновлювальний агент.

Попри значний потенціал природного газу як хімічної сировини, ступінь його глибокої переробки залишається низьким. Значна частина супутнього нафтового газу, що утворюється під час видобутку нафти, спалюється у факелах. Це призводить до втрати цінної вуглеводневої сировини та створює суттєві екологічні загрози у регіонах видобутку. Враховуючи ці фактори, актуальним є завдання розробки ефективних технологій переробки легкої вуглеводневої сировини.

Однією з перспективних технологій у цьому напрямі є процес окислювальної конденсації метану (ОКМ), який активно досліджується як на території країн, що входили до колишнього СРСР [1–4], так і у США [5] та країнах Європейського Союзу [6–8].

Незважаючи на значну наукову зацікавленість до процесу ОКМ і вже досліджені механізми його перебігу та каталізатори [10–12], ця технологія наразі не отримала повномасштабного промислового впровадження.

Протягом першого року експлуатації було проведено 18 випробувань за різних температур, тисків та швидкостей подачі газу. Установа

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		10

продемонструвала гнучкість до вхідної сировини (метан, повітря, кисень) і можливість варіювання вмісту етану шляхом рециркулу.

Філософія *Siluria Technologies* базується на інтенсивному експериментальному підході — випробуванні великої кількості каталізаторів [14]. Компанією створено автоматизовану установку для високошвидкісного синтезу і тестування каталізаторів, яка дає змогу одночасно аналізувати сотні зразків. Було синтезовано та протестовано понад 50 000 каталізаторів.

1.2 Опис процесу окислювальної конденсації метану

Технологічна схема процесу окислювальної конденсації метану (ОКМ) може бути реалізована у двох варіантах: із застосуванням рециркуляції непрореагованої сировини або без неї (рис. 1.1).

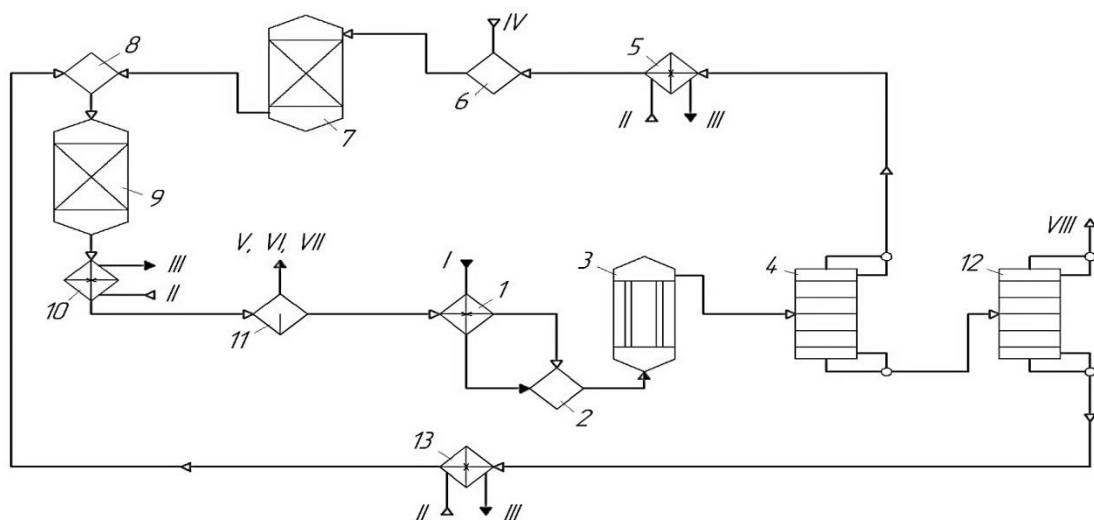


Рисунок 1.1 – Технологічна схема процесу окислювальної конденсації метану

Принцип роботи схеми з рециркуляцією полягає в наступному. Зріджений природний газ спочатку проходить через теплообмінник (поз. 1), після чого надходить до змішувача (поз. 2), де відбувається з'єднання свіжої сировини з непрореагованим метаном, повернутим із циклу. Отримана газова суміш подається до випарника (поз. 3), де здійснюється перехід метану з рідкого стану в пароподібний.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		11

Далі потік направляється до деметанізатора, у якому метан відокремлюється від інших компонентів газової суміші. Виділений метан, у поєднанні з новою порцією природного газу, проходить крізь теплообмінник (поз. 5) та надходить до реактора ОКМ (поз. 7). До того ж реактора за допомогою змішувача (поз. 6) подається кисень.

В реакторі окислювальної конденсації метану відбувається основна хімічна реакція за температури близько 800 °С, у результаті якої утворюються С₂-вуглеводні. Суміш, що виходить із реактора, надходить до реактора дегідрування етану (поз. 9), де використовується теплота, що виділяється під час реакції ОКМ. Процес дегідрування етану відбувається при температурі близько 600 °С.

Далі реакційна суміш проходить через теплообмінник (поз. 10) і потрапляє до сепаратора (поз. 11), де відбувається відділення побічних продуктів, зокрема водню, водяної пари та вуглекислого газу. Після цього залишкова газова суміш, проходячи теплообмінник 1 (де частково охолоджується і віддає тепло свіжому метану), знову надходить до деметанізатора, а згодом — у колону розділення етилену.

Етан, який не прореагував на стадії дегідрування, повертається до реактора дегідрування для подальшого перетворення на етилен. Таким чином, завдяки рециркуляції непрореагованих компонентів реалізується замкнутий цикл переробки природного газу з максимально ефективним використанням сировини.

Висновки до розділу

У результаті аналізу літературних джерел встановлено, що процес окислювальної конденсації метану (ОКМ) є перспективним напрямом прямої переробки природного газу з метою отримання цінних нафтохімічних продуктів, зокрема етилену. На відміну від традиційних багатостадійних схем, процес ОКМ дозволяє здійснювати перетворення метану в С₂-вуглеводні в одну

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		12

стадію, за умов атмосферного тиску, що знижує енергетичні та капітальні витрати.

Окрему увагу приділено питанням вибору каталізатора, який є ключовим фактором ефективності процесу. Наведено класифікацію існуючих каталізаторів за хімічною природою, функціональністю та умовами їх застосування. Встановлено, що найефективніші каталізатори забезпечують селективність за C₂-продуктами до 80 % при конверсії метану на рівні 25–30 %.

Описано основні технологічні рішення реалізації процесу ОКМ, зокрема схеми з рециркуляцією, які дозволяють підвищити ступінь використання сировини та оптимізувати тепловий баланс установки. Наведено приклади дослідницьких та промислових ініціатив, зокрема досвід компанії *Siluria Technologies*, що підтверджує практичну зацікавленість у впровадженні цієї технології.

Таким чином, узагальнення наукових джерел та аналіз наявних підходів до реалізації процесу ОКМ свідчить про високий потенціал технології як з наукової, так і з прикладної точки зору, та обґрунтовує доцільність подальших досліджень у напрямку автоматизації та інтелектуального керування цим процесом.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		13

2 ВИБІР ОПТИМАЛЬНОГО ВАРІАНТУ ТЕХНОЛОГІЧНОЇ СХЕМИ ПРОЦЕСУ ОКИСЛЮВАЛЬНОЇ КОНДЕНСАЦІЇ МЕТАНУ НА ОСНОВІ РЕЗУЛЬТАТІВ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

2.1 Середовище ChemCAD як інструмент комп'ютерного моделювання процесу окислювальної конденсації метану

Пакет прикладних програм ChemCAD є потужним інструментом комп'ютерного моделювання технологічних процесів, що широко використовується під час проектування, модернізації та оптимізації хімічних, нафтохімічних і нафтопереробних виробництв. Ця система призначена для побудови та розрахунку технологічних схем із рециркуляційними потоками органічних і неорганічних сполук, включаючи безперервні суміші, типові для нафтопродуктів, а також для моделювання енергетичних потоків.

ChemCAD забезпечує можливість створення, аналізу й оптимізації різних варіантів технологічного оформлення виробничих процесів, а також дозволяє здійснювати оцінювання їх ефективності з метою вибору найбільш раціонального рішення.

Комплексне застосування програмного середовища ChemCAD у дослідженнях дає змогу досягати високого ступеня узгодженості між розрахунковими результатами та експериментальними промисловими даними. Це, у свою чергу, відкриває можливості для розв'язання задач автоматизованого керування технологічними процесами, підвищення ефективності функціонування існуючих виробництв і визначення оптимальних режимних та конструктивних параметрів роботи окремих апаратів з урахуванням потреб виробництва в цілому.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		14

Налаштування програмного середовища ChemCAD 6.3.1 для моделювання процесу ОКМ.

На початковому етапі роботи з програмним пакетом ChemCAD 6.3.1 необхідно здійснити базове налаштування середовища відповідно до вимог моделювання. Нижче подано алгоритм підготовки до створення технологічної схеми процесу окислювальної конденсації метану (ОКМ):

1. Створення нового проекту.

Для ініціалізації нового проекту користувач повинен запустити програму ChemCAD і у головному меню обрати команду *File* → *New* (або натиснути сполучення клавіш Ctrl+N). Після створення нового файлу його слід зберегти через *File* → *Save As*, вказавши ім'я файлу, наприклад OCM_flowsheet.csb, і натиснувши клавішу ОК.

2. Визначення системи одиниць вимірювання.

Для забезпечення коректності розрахунків доцільно задати систему одиниць SI. Це здійснюється через пункт меню *Format* → *Engineering Units*. У вікні, що відкриється (рис. 2.1), необхідно обрати відповідні одиниці вимірювання для всіх фізичних величин.

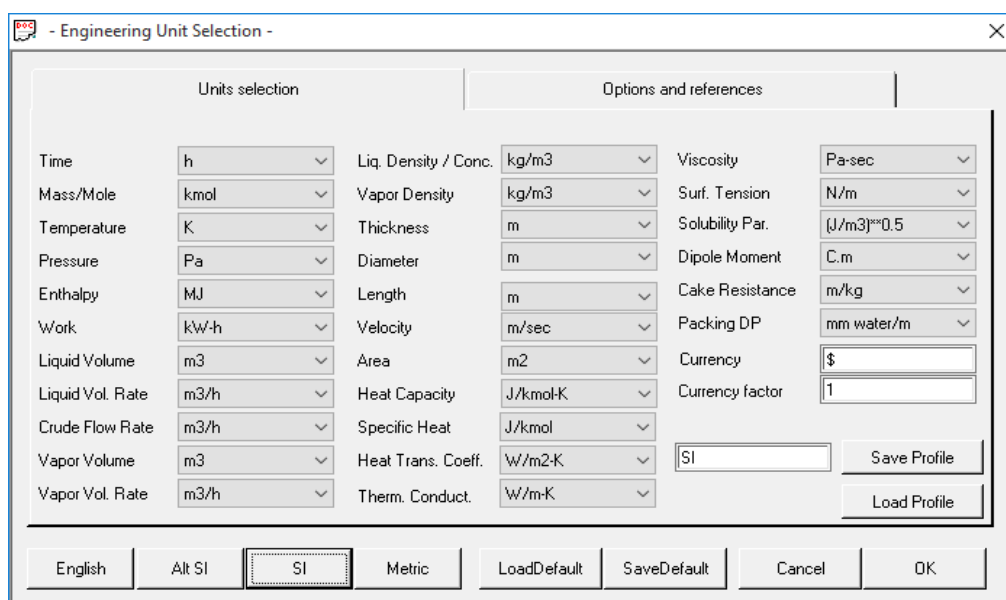


Рисунок 2.1 – Вікно вибору одиниць вимірювання

3. Вибір компонентів (речовин), що входять до технологічної схеми.

Додавання речовин до моделі здійснюється з вбудованої бази даних компонентів. Для цього в меню необхідно перейти за маршрутом *Thermophysical* → *Select Components*. У вікні вибору компонентів (рис. 2.2) до списку включаються наступні речовини:

- вода
- етилен
- кисень
- водень
- етан
- вуглекислий газ
- метан.

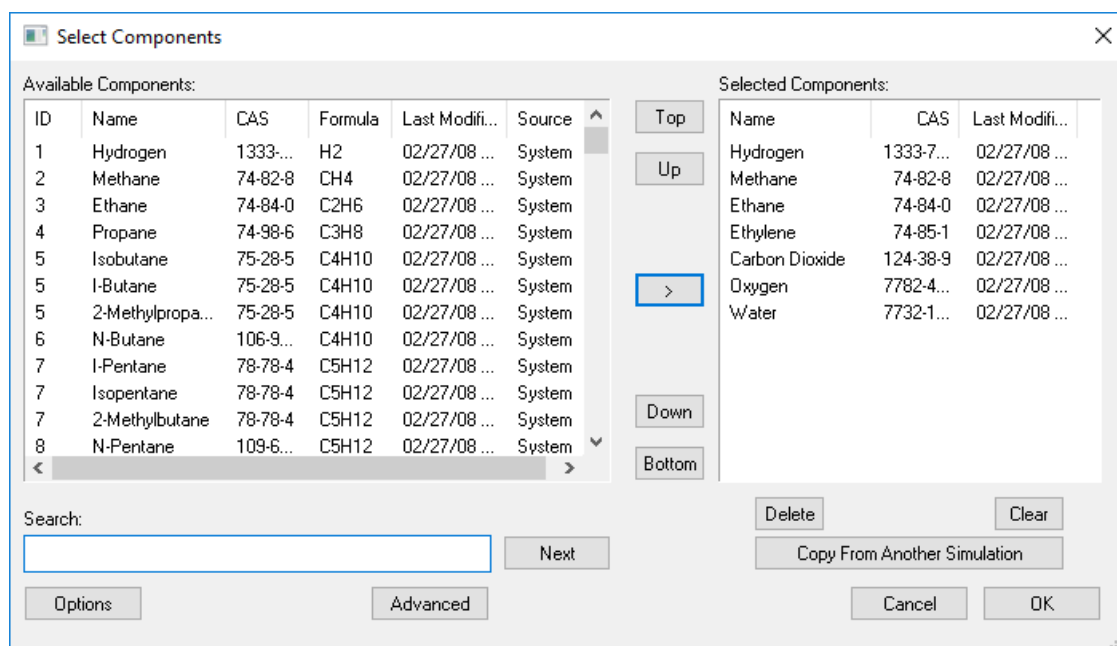


Рисунок 2.2 – Вікно вибору компонентів у ChemCAD

4. Формування технологічної схеми.

Наступним етапом є формування схеми з використанням відповідних апаратів. У програмі ChemCAD представлена широка бібліотека

технологічного обладнання, яка розташовується праворуч від основного робочого поля (рис. 2.3). З бібліотеки обираються реактори, теплообмінники, сепаратори та інші апарати відповідно до розроблюваної технології.

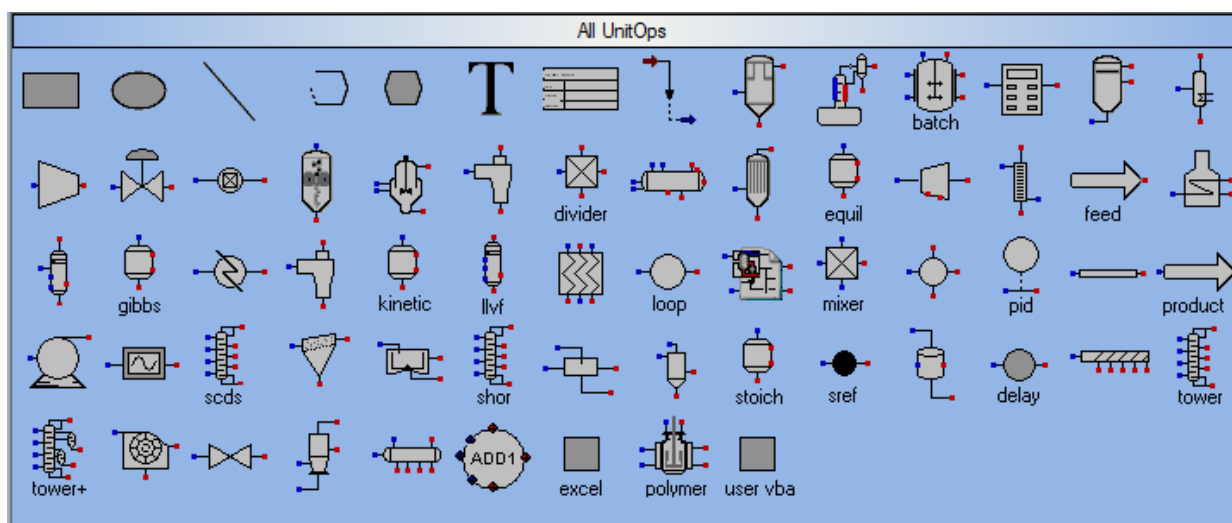


Рисунок 2.3 – Бібліотека апаратів у ChemCAD

2.2 Розробка технологічної схеми процесу

Технологічна схема процесу окислювальної конденсації метану включає 13 апаратів, два вхідні та два вихідні потоки. Моделювання схеми здійснюється в програмному середовищі ChemCad 6.3.1 відповідно до принципової схеми, наведеної на рисунку 1.2 [11–13]. Створена модель подана на рис. 2.4.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		17

На першому етапі задаються параметри вхідного потоку 1 — зрідженого природного газу (рис. 2.5) та вхідного потоку 2 — кисню (рис. 2.6). У налаштуваннях зазначаються значення температури, тиску в трубопроводі та масової витрати компонентів (у даному випадку – у кг/год).

Stream No.	1
Stream Name	Природний га
Temp K	113
Pres Pa	101325
Vapor Fraction	0.9107727
Enthalpy MJ/h	-3586.085
Total flow	700
Total flow unit	kg/h
Comp unit	kg/h
Hydrogen	18
Methane	640
Ethane	21
Ethylene	0
Carbon Dioxide	21
Oxygen	0
Water	0

Рисунок 2.5 – Налаштування технологічних параметрів вхідного потоку природного газу

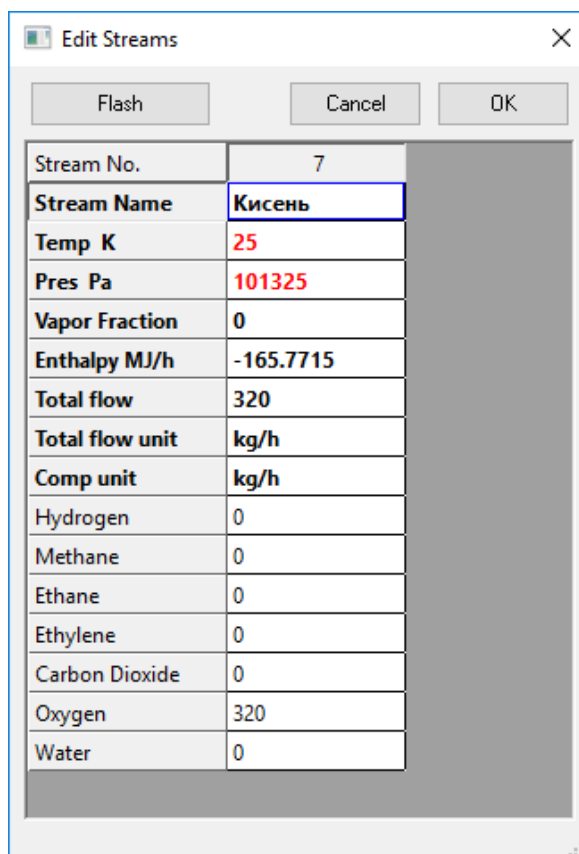


Рисунок 2.6 – Налаштування параметрів вхідного потоку кисню

Далі налаштовується реактор окислювальної конденсації метану (ОКМ). У параметрах цього апарата (рис. 2.7) задається термічний режим з температурою в реакторі 800 °С. Як основний реагент обирає газ-метан, зі ступенем перетворення 0,2. Також вносяться стехіометричні, відповідно, коефіцієнти для реакції ОКМ.

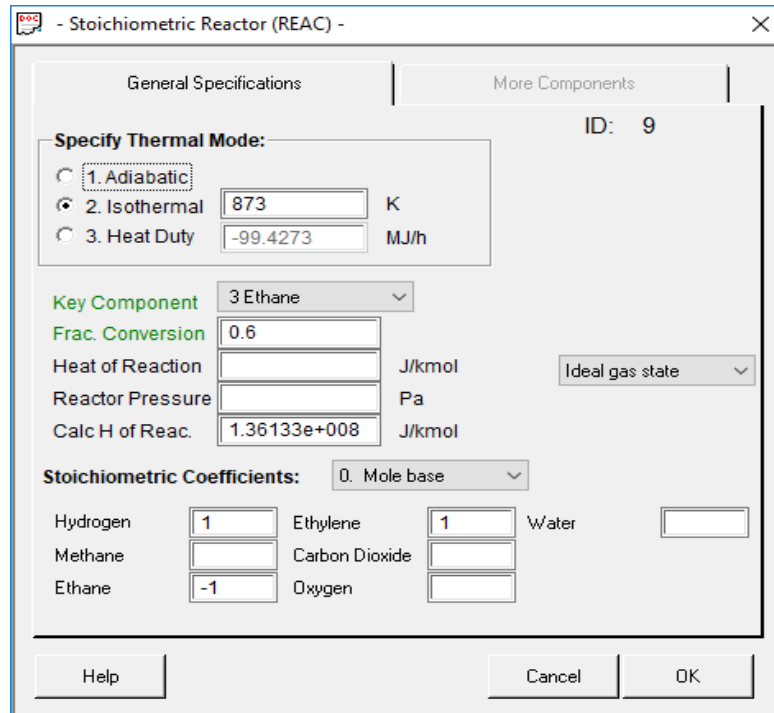


Рисунок 2.8 – Налаштування параметрів реактора дегідрування етану

Для випарника встановлюються наступні параметри: температура випаровування – 0 °C (273 K), тиск усередині апарата – 101 325 Па (рис. 2.9).

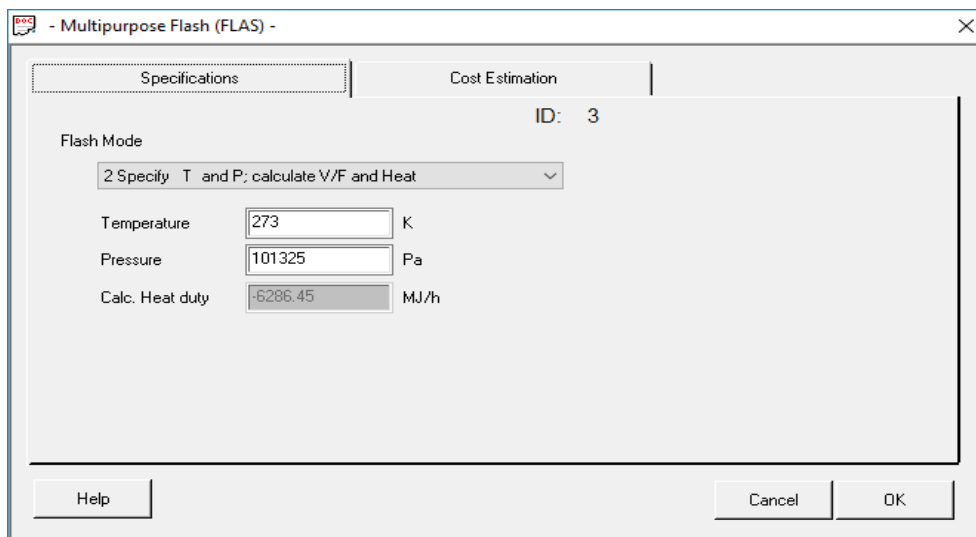


Рисунок 2.9 – Налаштування параметрів випарника

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		22

Після завершення налаштування всіх елементів технологічної схеми, виконується її розрахунок за допомогою функції Run All. Для перегляду докладної інформації щодо будь-якого потоку достатньо навести курсор на відповідний протік. Приклад відображення інформації для потоку №13 (рециркуляційного) наведено на рисунку 2.10.

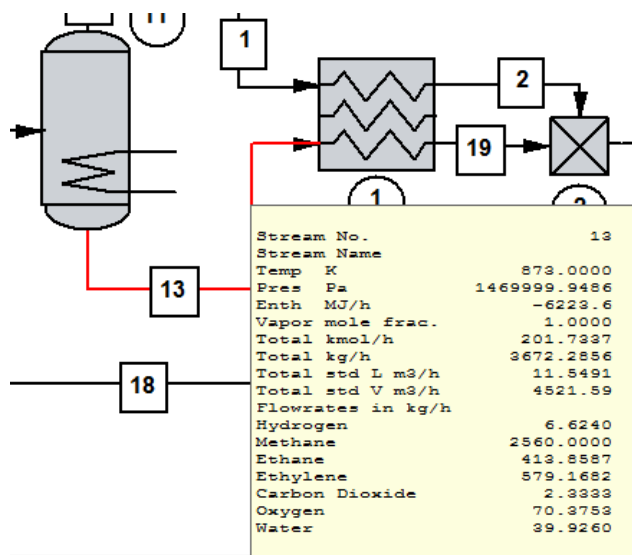


Рисунок 2.10 – Інформаційна схема про рециркуляційний потік №13

На основі результатів комп'ютерного моделювання побудовано порівняльну діаграму ефективності використаних каталізаторів, яка представлена на рис. 2.11.

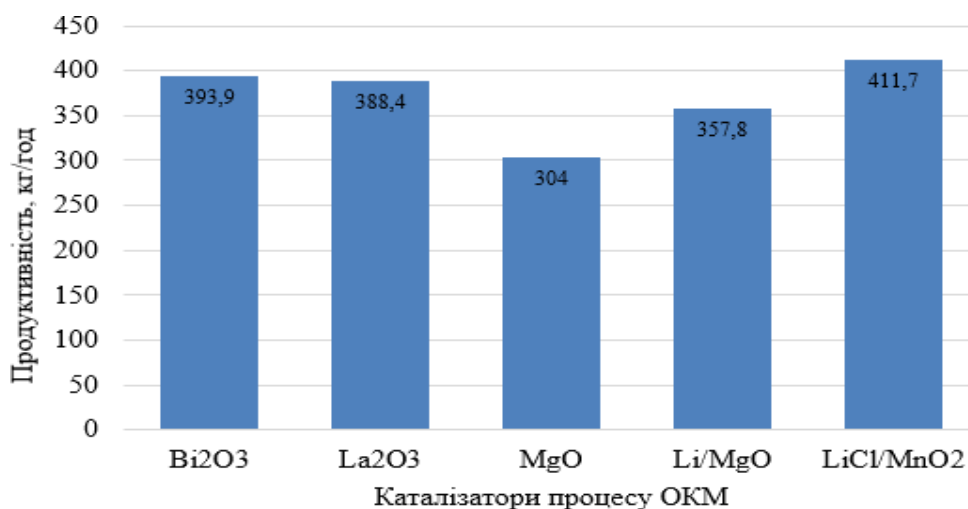


Рисунок 2.11 – Порівняльна діаграма ефективності каталізаторів у процесі ОКМ

Висновки до розділу

З метою оцінки ефективності рекомендацій, наданих системою підтримки прийняття рішень (СППР) щодо вибору оптимального каталізатора для процесу окислювальної конденсації метану (ОКМ), було проведено серію експериментів у програмному середовищі ChemCad 6.3.1. Моделювання здійснювалося на основі розробленої технологічної схеми з використанням п'яти різних каталізаторів, що мали попередньо визначені експлуатаційні характеристики.

Критерієм порівняння слугувала продуктивність схеми за етиленом. Результати моделювання показали, що найбільш ефективною виявилася схема з каталізатором LiCl/MnO_2 , який також був рекомендований СППР як оптимальний варіант. Це підтверджує надійність та практичну доцільність використання СППР під час прийняття рішень щодо проектування та оптимізації хіміко-технологічних процесів, зокрема ОКМ.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		24

3 СИНТЕЗ АВТОМАТИЧНОЇ СИСТЕМИ КЕРУВАННЯ ПРОЦЕСОМ КОНДЕНСАЦІЇ МЕТАНУ

3.1 Моделювання процесу окислювальної конденсації метану

Математичну модель процесу побудовано на основі положень, викладених у [2]. Реакція відбувається з виділенням тепла, кількість якого в одиницю часу описується рівнянням:

$$Q = k * q_p \quad (3.1)$$

де:

k — швидкість хімічної реакції,

q_p — тепловий ефект реакції.

Згідно з рівнянням хімічної кінетики Арреніуса, швидкість реакції визначається наступним чином:

$$k(T) = k_0 * e^{-\frac{E}{RT}} \quad (3.2)$$

де:

k_0 — передекспоненційний множник (фактор частоти), що залежить від кількості зіткнень реагуючих молекул;

E — енергія активації, кДж/кмоль;

R — універсальна газова стала, кДж/(кмоль·К);

T — абсолютна температура, К.

Тепловий баланс для конвертора може бути поданий у вигляді:

$$M * c * \frac{d}{dt} T = q_{cm} + Q \quad (3.3)$$

де:

M — маса конвертованого газу,

c — теплоємність конвертованого газу,

q_c — тепловий потік, переданий від стінки трубопроводу до газу,

Q — тепло, що виділяється внаслідок хімічної реакції.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		25

Тепловий потік q_{cm} визначається за виразом:

$$q_{cm} = a_{cm} * S * (T_{cm} - T) \quad (3.4)$$

де:

a_{cm} — коефіцієнт тепловіддачі від стінки трубопроводу до газу,

S — площа теплообміну,

T_{cm} — середня температура стінки трубопроводу,

T — температура газу.

Для визначення температури T_{cm} складається рівняння теплового балансу стінки трубопроводу:

$$M_{cm} * c_{cm} \frac{d}{dt} T_{cm} = q_n - a_{cm} \quad (3.5)$$

де:

M_{cm} — маса стінки,

c_{cm} — теплоємність матеріалу стінки,

q_n — тепловий потік, що надходить до стінки ззовні,

q_{cm} — тепловий потік, що передається від стінки до газу.

Таким чином, залежність теплових потоків у системі тісно пов'язана з температурними градієнтами між газом та стінками трубопроводу, що враховується у побудові динамічної математичної моделі теплообміну.

Залежність теплового потоку, переданого від конвертованого газу до стінки, описується наступним рівнянням:

$$q_n = a_n * S(T_n - T_{cm}) \quad (3.6)$$

Підставивши рівняння (3.4) та (3.6) у рівняння теплового балансу стінки (3.5), отримаємо:

$$M_{cm} * c_{cm} \frac{d}{dt} T_{cm} = a_n * S(T_n - T_{cm}) - a_{cm} * S * (T_{cm} - T) \quad (3.7)$$

Виразимо температуру стінки T_{cm} із рівняння (3.7):

$$T_{cm} = \frac{a_n * S * T_n + a_{cm} * S * T}{M_{cm} * c_{cm} * p + a_n * S - a_{cm} * S_{cm}} \quad (3.8)$$

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		26

де $p = \frac{d}{dt}$ – оператор диференціювання

Підставляючи рівняння (3.1) та (3.8) у (3.3), отримуємо узагальнене рівняння теплового балансу процесу конверсії метану в трубчатому конверторі, яке враховує фізичні характеристики газу та параметри апарата:

$$\begin{aligned} & T(M * c * M_{cm} * c_{cm} * p^2 \\ & + (M * c * a_n * S + a_{cm} * S * M * c + a_{cm} * S * M_{cm} * c_{cm} - \Phi \\ & * M_{cm} * c_{cm}) * p + a_n * S^2 * a_{cm} - \Phi * a_n * S - \Phi * a_{cm} * S)' \\ & = a_{cm} * S^2 * a_n * T_n \end{aligned}$$

Ураховуючи, що згідно з теорією активованого комплексу залежність фактора частоти зіткнень від температури є слабшою за експоненційну (зміна температури в межах 200–300 °С призводить лише до ~10 % зміни частоти зіткнень), допускаємо наявність незначної нелінійності. За цього припущення виконуємо лінеаризацію експоненційної залежності Арреніуса:

$$f(T)_{T=T_0} = k_0 * e^{-\frac{E}{RT}} \approx \frac{df(T)}{dT} T_0 = k_0 * e^{-\frac{E}{RT}} * \frac{E}{R * T_0^2} \quad (3.9)$$

Відкидаючи члени вищих порядків, отримаємо лінійне диференціальне рівняння теплового балансу у вигляді:

$$\begin{aligned} & T * \left(M * c * M_{cm} * c_{cm} * p^2 \right. \\ & + \left(M * c * a_n * S + a_{cm} * S * M * c + a_{cm} * S * c_{cm} * M_{cm} - k_0 * q_p \right. \\ & * \left. e^{-\frac{E}{RT}} * \frac{E}{R * T_0^2} * M_{cm} * c_{cm} \right) * p + a_n * S^2 * a_{cm} - k_0 * q_p * e^{-\frac{E}{RT}} \\ & * \left. \frac{E}{R * T_0^2} * a_n * S - k_0 * q_p * e^{-\frac{E}{RT}} * \frac{E}{R * T_0^2} * a_{cm} * S \right) \\ & = a_{cm} * S^2 * c_n * T_n \end{aligned}$$

						БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата			27

Виконаємо формальну заміну змінних:

$T=y$, $T_n=u$, та позначимо коефіцієнти:

$$a_0 = M * c * M_{cm} * c_{cm}$$

$$a_1 = M_n * c * a * S + a_{cm} * S * M * c + a_{cm} * S * c_{cm} * M_{cm} - k_0 * q_p * e^{-\frac{E}{RT}} * \frac{E}{R * T_0^2} * M_{cm} * c_{cm}$$

$$a_2 = a_n * S^2 * a_{cm} - k_0 * q_p * e^{-\frac{E}{RT}} * \frac{E}{R * T_0^2} * a_n * S - k_0 * q_p * e^{-\frac{E}{RT}} * \frac{E}{R * T_0^2} * a_{cm} * S$$

$$K_u = a_{cm} * S^2 * a_n$$

Тоді рівняння набуває класичної форми:

$$a_0 * \frac{d^2y}{dt^2} + a_1 \frac{dy}{dt} + a_2 * y = K_u * u$$

На основі принципу суперпозиції для лінійних систем, передатна функція об'єкта управління матиме вигляд:

$$W(p) = \frac{K_u}{a_0 * p^2 + a_1 * p + a_2} \quad (3.10)$$

Параметри об'єкта моделювання:

- Маса конвертованої суміші: $M=989$ кг
- Маса стінки конвертора: $M_{cm}=1000$ кг
- Теплоємність суміші: $c=18$ Дж/(кг·°С)
- Теплоємність стінки: $c_{cm}=540$ Дж/(кг·°С)
- Коефіцієнт тепловіддачі: $a_{cm}=62.8$ Дж/(с·м²·°С}
- Площа теплообміну: $S=9.42$ м²
- Фактор частоти зіткнень: $k_0=0.7$
- Енергія активації: $E=820$ кДж/кмоль
- Газова стала: $R=8.31$ кДж/(кмоль·К)
- Тепловий ефект реакції: $q_p=112$ Дж/кг

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		28

Для забезпечення заданої якості перехідного процесу необхідно, щоб система мала достатній запас стійкості. Вважається, що система є динамічно стійкою, якщо показник коливальності M знаходиться в межах:

$$M \in [1.3; 2.3],$$

що відповідає ступеню загасання $\psi = 0.95 \div 0.75$. У даному розрахунку приймається:

$$M = 1.55.$$

Передатна функція об'єкта управління в частотній області має вигляд:

$$W(p) = \frac{1}{3.97 \cdot 10^4 \cdot (j \cdot \omega)^2 + 761 \cdot j \cdot \omega + 1} \quad (3.12)$$

Частотна передатна функція П-регулятора визначається як:

$$W_p(\omega) = k_p \quad (3.13)$$

АЧХ і ФЧХ розімкнутої системи:

Для визначення оптимального значення k_p була побудована амплітудно-фазова частотна характеристика (АФЧХ) розімкнутої системи у середовищі Mathcad. Параметр k_p підбирався таким чином, щоб характеристика дотикалася до межі забороненої області, що відповідає вибраному значенню показника коливальності M . Результати графічного аналізу подано на рис. 3.3.

Оптимальне значення коефіцієнта підсилення k_p обчислюється за формулою:

$$k_p = \frac{M}{M^2 - 1} * \frac{1}{r_{3.0}}$$

де $r_{3.0}$ — радіус забороненої області на комплексній площині.

У результаті розрахунку:

$$k_p = 27.585$$

Перехідна характеристика замкнутої системи при оптимальному налаштуванні регулятора подана на рис. 3.4.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		31

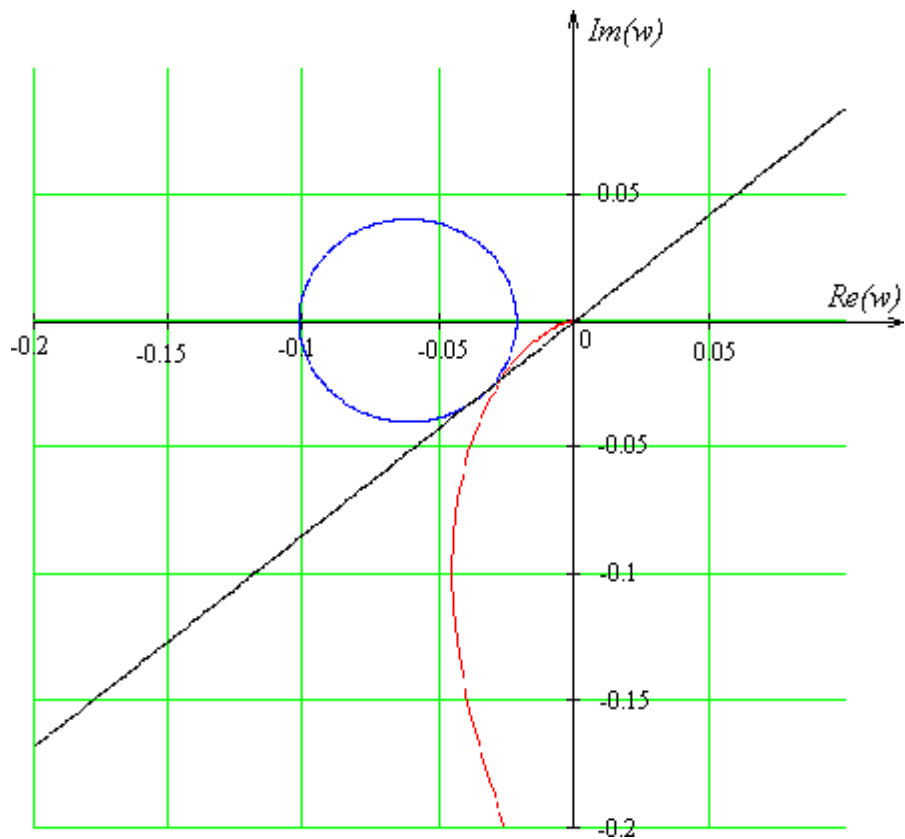


Рисунок 3.3 – АФЧХ розімкнутої системи та заборонена область

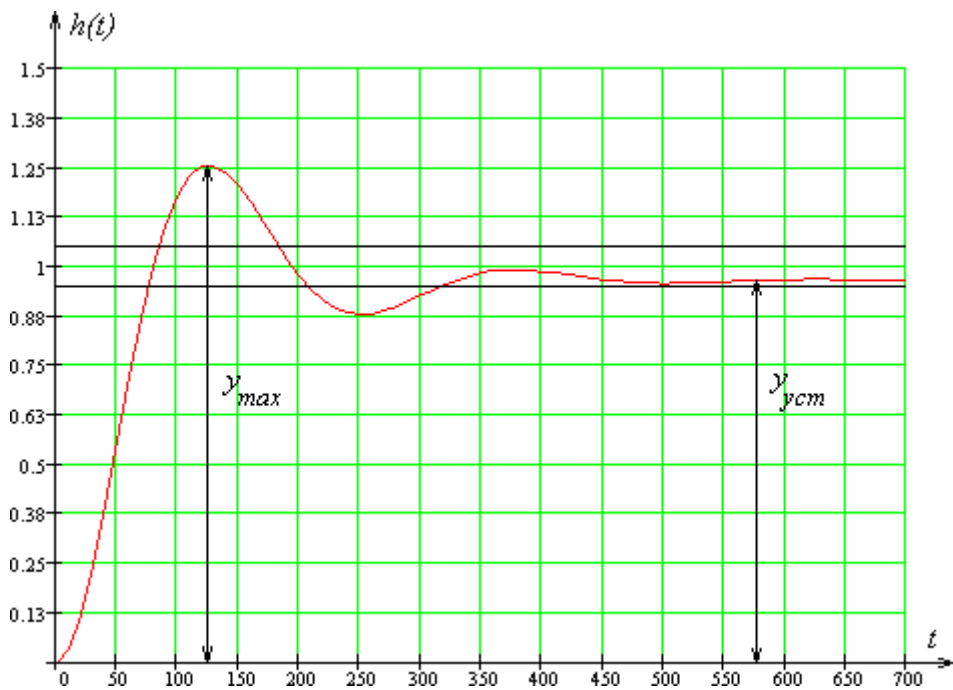


Рисунок 3.4 – Перехідна характеристика замкнутої системи

За графіком перехідної характеристики визначено основні показники якості:

- **Перерегулювання:**

$$\sigma = 25\%$$

- **Час перехідного процесу:**

$$t_p=318\text{с}$$

- **Статична похибка:**

$$\varepsilon_{\text{стат}} \approx 3\%$$

Отримані результати свідчать про те, що система зі встановленим регулятором має прийнятні показники динамічної та статичної якості регулювання.

Розрахунок налаштувань ПІ-регулятора.

Передатна функція ПІ-регулятора має вигляд:

$$W_p(p) = k_p * \left(1 + \frac{1}{T_i p}\right) \quad (3.14)$$

де:

k_p — коефіцієнт підсилення регулятора;

T_i — час інтегрування.

Передатна функція (частотна) ПІ-регулятора задається наступним аналітичним виразом:

$$W_p(\omega) = k_p * \left(1 + \frac{1}{T_i j\omega}\right) \quad (3.15)$$

Побудовано сімейство амплітудно-фазових характеристик (АФЧХ) розімкнутої системи:

$$W(\omega) = W_p(\omega) * W_{oy}(\omega)$$

для різних значень T_i , використовуючи пакет Mathcad. Для кожного значення T_i визначено коефіцієнт підсилення k_p , при якому характеристика дотикається до критичного кола при заданому показнику коливальності M . Результати представлено на рис. 3.5.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		33

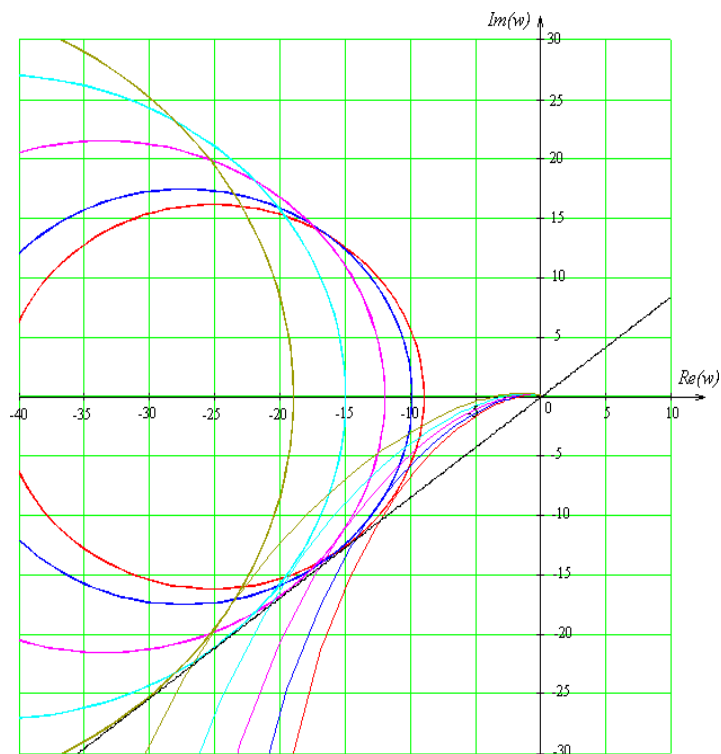


Рисунок 3.5 — Сімейство АФЧХ розімкнутої системи

Згідно з формулою (3.14), для кожного значення T_i розраховано відповідний коефіцієнт підсилення k_p . Дані зведено у табл. 3.1.

Таблиця 3.1 — Налаштування ПІ-регулятора

T_i, c	10	13	16	19	22	25	28	31	34	37	40	43
k_p	3.26	3.42	3.58	3.61	3.74	3.97	4.53	4.83	5.12	5.71	6.24	7.39

На основі цих даних побудовано графік залежності $k_p(T_i)$, зображений на рис. 3.6.

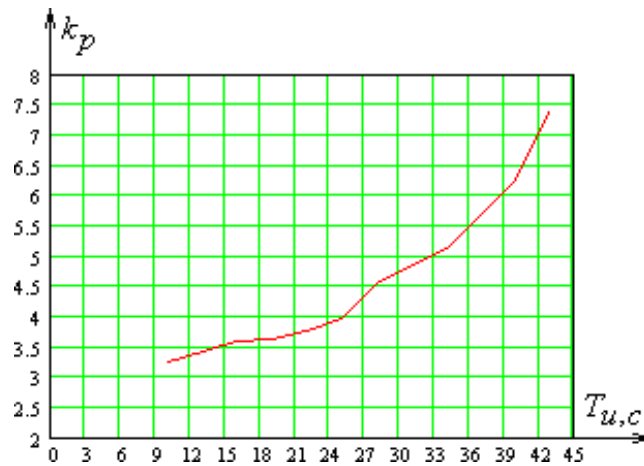


Рисунок 3.6 — Межа області при заданому значенні M

Для оцінки якості регулювання побудовано графіки перехідних характеристик замкнутої системи для вибраних значень T_i : 25 с, 31 с, 37 с, 43 с. Результати наведено на рис. 3.7.

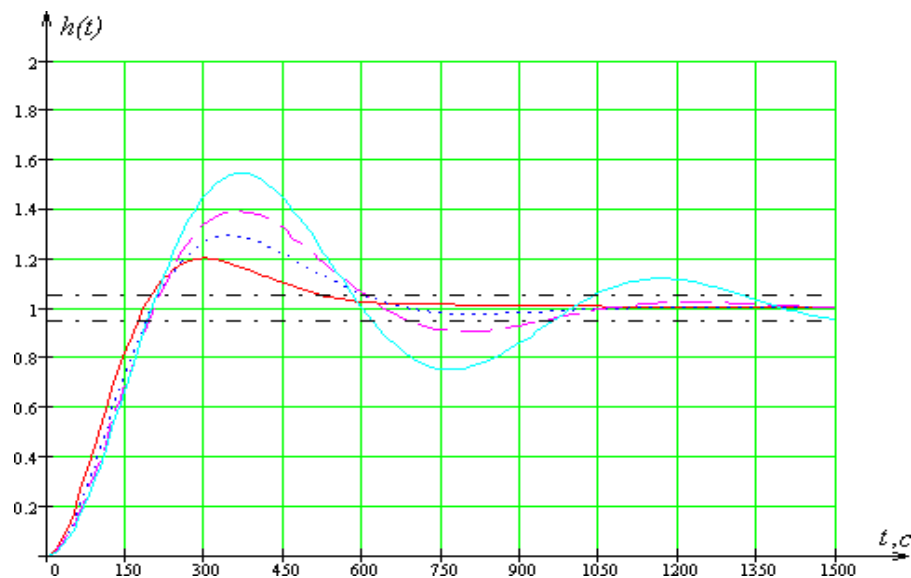


Рисунок 3.7 — Перехідні характеристики САУ при різних значеннях часу інтегрування T_i

Найкращі показники якості отримано для пари налаштувань:

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		35

$$k_p=7.39, T_i=43 \text{ с.}$$

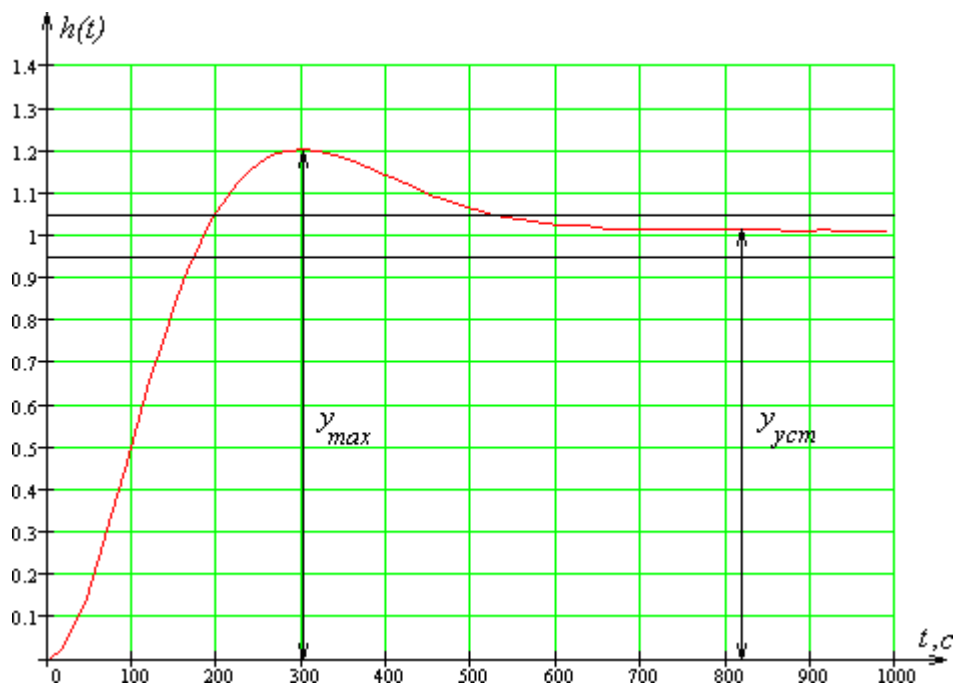


Рисунок 7.8 — Перехідна характеристика замкнутої системи при $k_p=7.39$,
 $T_i=43 \text{ с.}$

Показники якості регулювання:

- **Перерегулювання:**

$$\sigma = 20\%$$

- **Час перехідного процесу:**

$$t_p=540\text{с}$$

Розрахункова частина налаштування ПД-регулятора.

Передатна функція (частотна) ПД-регулятора має наступний вигляд:

$$W_{nid}(p) = k * \left(1 + \frac{1}{T_i * p} + T_d * p \right) \quad (3.16)$$

де:

k — коефіцієнт підсилення регулятора;

T_i — час інтегрування;

T_d — час диференціювання.

										Арк.
										36
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата						

Частотна передатна функція ПД-регулятора:

$$W_{\text{під}}(\omega) = k * + \frac{1}{T_i * j * \omega} + a * T_i * j * \omega \quad (3.17)$$

де $a=Td/T_i$. Для підвищення стійкості до шумів прийнято:

$$\frac{T_d}{T_i} < 0.25 \quad (3.18)$$

Побудовано сімейство АФЧХ розімкнутої системи $W(\omega)=W_{\text{PID}}(\omega) \cdot W_{\text{об}}(\omega)$ у середовищі Mathcad. Для кожного T_i знайдено відповідний k , що забезпечує дотик до критичного кола при заданому M . Результати наведено на рис. 3.9.

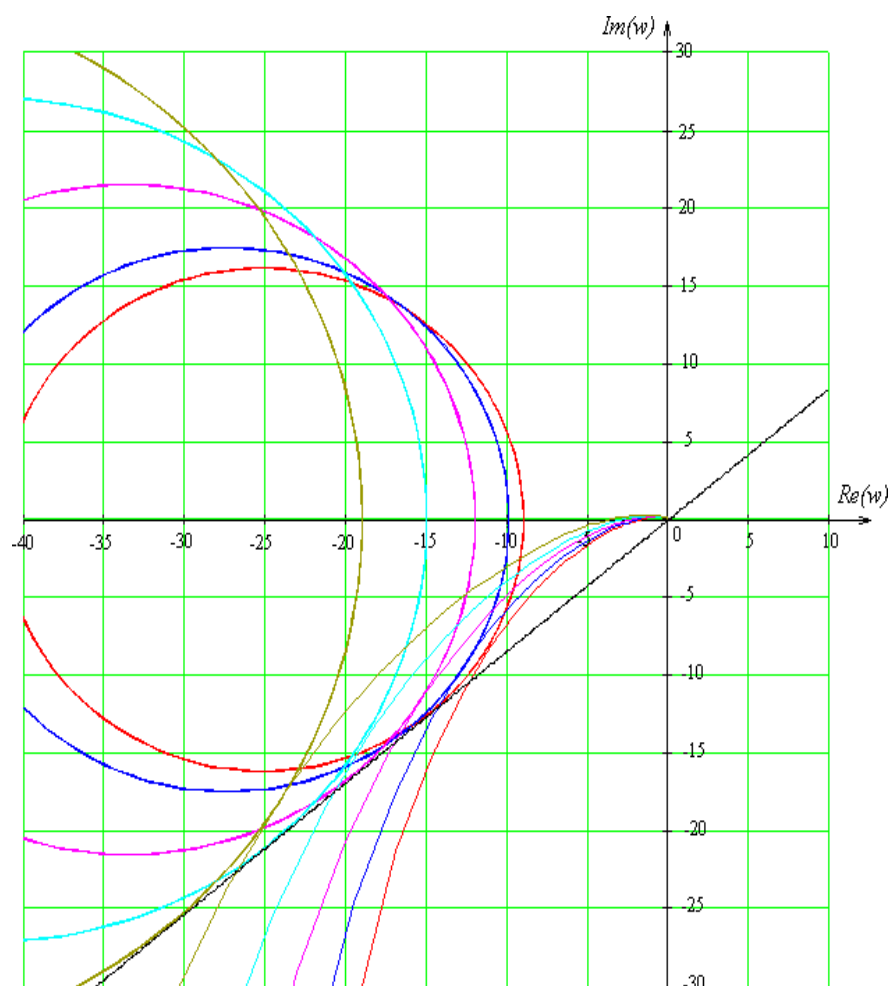


Рисунок 3.9 — Сімейство АФЧХ розімкнутої системи з ПД-регулятором

Розраховані параметри зведено в таблицю 3.2.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		37

Таблиця 3.2 — Налаштування ПД-регулятора

T_i, c	10	13	16	19	22	25	28	31	34	37	40	43
T_d, c	2	2.6	3.2	3.8	4.4	5	5.6	6.2	6.8	7.4	8	8.6
k	3.29	3.46	3.61	3.63	3.72	3.95	4.54	4.83	5.13	5.69	6.22	7.41

Побудовано графік залежності $k(T_i)$, що представлений на рис. 3.10.

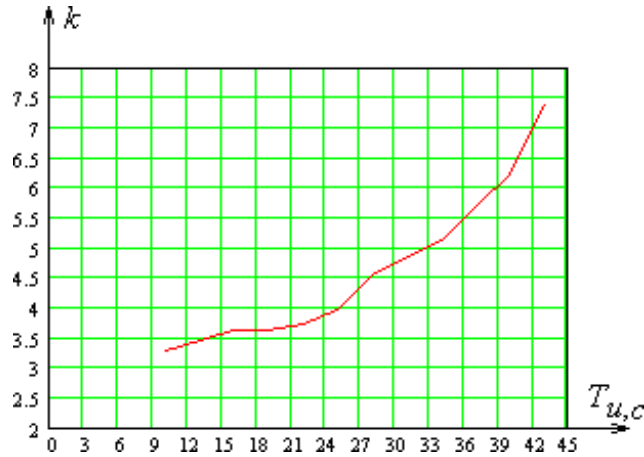


Рисунок 3.10 — Межа області для заданого M

Графіки перехідних характеристик замкнутої системи при різних значеннях T_i (25, 31, 37, 43 с) подано на рис. 3.11.

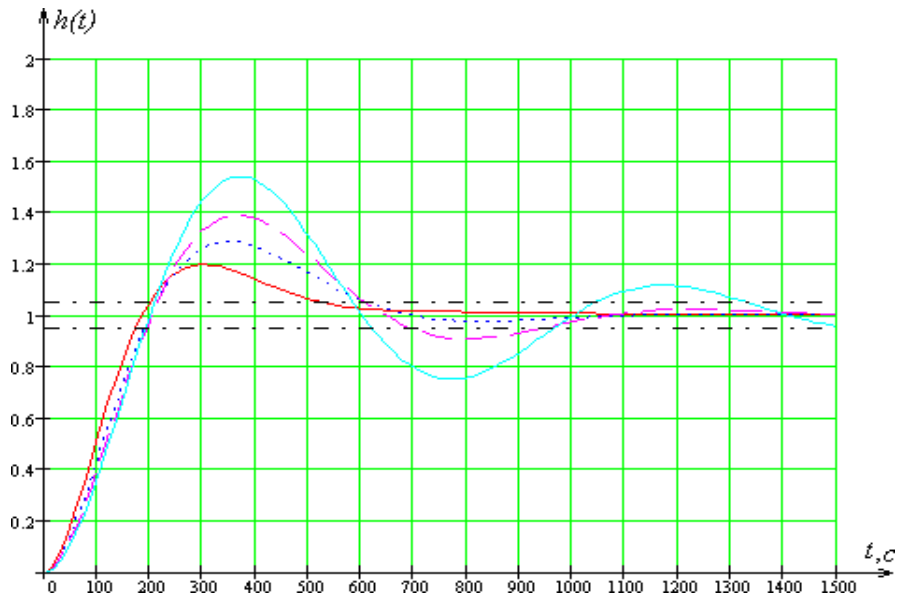


Рисунок 3.11 — Перехідні характеристики при різних параметрах ПД-регулятора

Найкращі показники якості отримано для:

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		38

$$k=7.41, T_i=43 \text{ с}$$

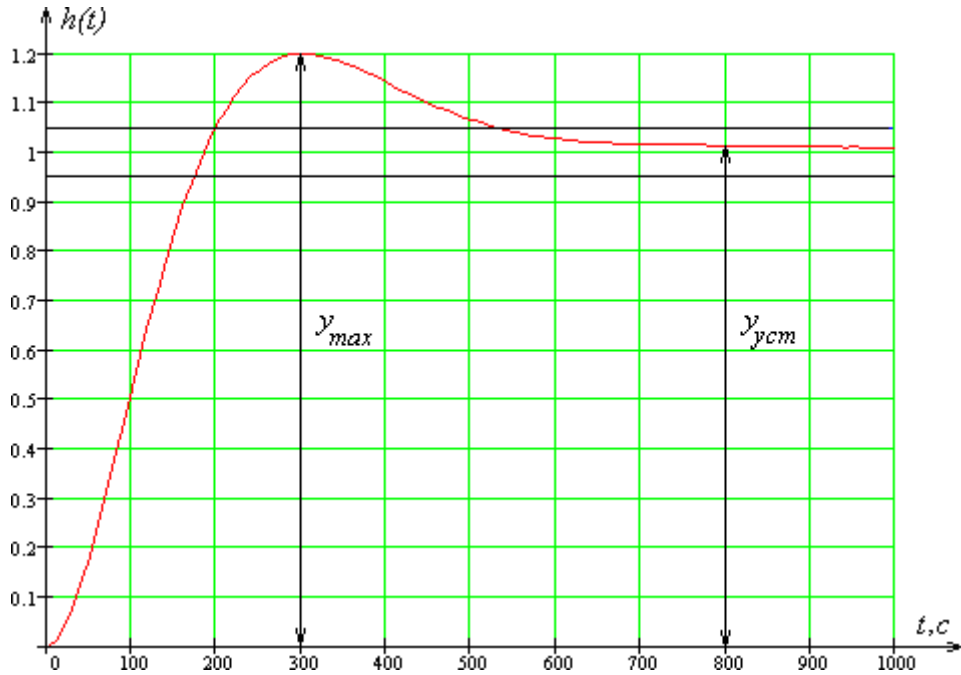


Рисунок 3.12 — Перехідна характеристика системи при $k=7.41, T_i=43 \text{ с}$

Показники якості регулювання:

- **Перерегулювання:**

$$\sigma = 20\%$$

- **Час перехідного процесу:**

$$t_p=535\text{с}$$

Висновок до розділу

Аналіз показав, що П-регулятор не забезпечує необхідної якості керування через наявність статичної помилки та значне перерегулювання (25%). ПІ та ПІД-регулятори демонструють порівняно високі характеристики якості, однак ПІД-регулятор є більш чутливим до перешкод і складнішим в реалізації. Тому, для забезпечення ефективного управління температурою в конверторі доцільно обрати ПІ-регулятор з оптимальними налаштуваннями $k_p=7.39, T_i=43 \text{ с}$.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		39

4 РОЗРОБКА ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ СИСТЕМИ ПРИЙНЯТТЯ РІШЕНЬ

4.1 Принципи побудови інтелектуальної СППР

Система підтримки прийняття рішень (СППР) — це комп'ютеризована інтерактивна інформаційна система, призначена для допомоги особі, що приймає рішення (ОПР), у процесі аналізу інформації, формування альтернатив та вибору оптимального рішення. СППР забезпечує ефективну обробку даних і моделей у складних предметних галузях, сприяючи розв'язанню слабо структурованих задач [7].

У даному дослідженні СППР розроблена з метою вибору найбільш ефективного каталізатора для конкретних умов перебігу хіміко-технологічного процесу.

Процес розробки прикладної СППР для заданої проблемної області охоплює такі основні етапи:

1. Вибір програмного середовища, яке забезпечує інтеграцію даних і знань та сумісність з іншими модулями.
2. Ідентифікація експертів-практиків галузі та формалізація їх знань за участі інженера зі знань.
3. Формування логіки прийняття рішень на основі технічних і економічних критеріїв.
4. Інтерактивне введення знань у програмну оболонку з валідацією логічної цілісності правил.
5. Тестування працездатності системи на базі контрольних прикладів.
6. Ітеративне вдосконалення системи за участі додаткових експертів.
7. Впровадження СППР у практику технологічного управління.

Розроблена СППР базується на двох підходах: методі аналізу ієрархій (MAI), що потребує експертного оцінювання, та методах інтелектуального аналізу даних (Data Mining), які здійснюють обробку без участі фахівця. Після вибору каталізатора передбачено моделювання процесу у середовищі ChemCad.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		40

Структура СППР представлена на рис. 4.1.



Рисунок 4.1 – Структура системи підтримки прийняття рішень

Система включає взаємодію з трьома програмними компонентами:

- **АНР-модуль** — реалізація методу аналізу ієрархій для поетапної побудови пріоритетів альтернатив.
- **See5** — інструмент для інтелектуального аналізу даних на основі дерева рішень.
- **ChemCad** — програмне середовище для моделювання хіміко-технологічних процесів [8].

Програмну реалізацію СППР виконано мовою програмування C++ у середовищі **Microsoft Visual Studio 2015**. Мова C++ підтримує мультипарадигмовий підхід, включаючи об'єктно-орієнтоване, узагальнене та процедурне програмування [9], і відома своєю високою швидкістю, кросплатформністю та можливістю роботи з низькорівневими структурами.

Visual Studio забезпечує розробку як консольних, так і графічних додатків із підтримкою інтерфейсу Windows Forms та технологій .NET Framework [10].

У середовищі Visual C++ реалізовано програмний модуль СППР, основні елементи якого наведено в таблиці 4.1.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		41

Таблиця 4.1 – Основні компоненти програмного модуля

Елемент	Назва	Призначення
Проект	DSS_Diploma_project_Dmitrii_Shahan.vcxproj	Комплекс програмних компонентів
Форма	UserForm.cpp	Головне вікно користувачького інтерфейсу
Меню	menuStrip1	Панель керування доступом до функцій програми
Кнопки	button_run_AHP, button_run_SEE5, ...	Виклик відповідних програм
Візуалізація	pictureBox1	Графічне оформлення

Програмний модуль включає дев'ять процедур обробки подій, наведені у таблиці 4.2.

Таблиця 4.2 – Процедури програмного модуля

Назва процедури	Призначення
UserForm_Load	Завантаження головної форми
button_run_AHP_Click	Запуск модуля вибору каталізатора за MAI
button_run_SEE5_Click	Запуск програми See5
button_run_CHEMCAD_Click	Запуск програми ChemCad
відкритиБДПрограмиАНРToolStripMenuItem	Доступ до бази даних АНР
відкритиБДПрограмиSee5ToolStripMenuItem	Доступ до бази даних See5
інструкціяКористувачаToolStripMenuItem	Відображення довідки користувача
проПрограмуToolStripMenuItem	Інформація про програму
завершитиРоботуToolStripMenuItem	Завершення роботи СППР

Для коректної роботи системи необхідне встановлення додаткового програмного забезпечення See5 і ChemCad під операційною системою Windows 7 або вище.

4.2 Функціонування інтелектуальних компонентів

Після запуску виконуваного файлу **DSS.exe** відкривається головне вікно програми (рис. 4.2), з якого користувач може обрати одну з трьох функціональних програм, натиснувши відповідну кнопку.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		42

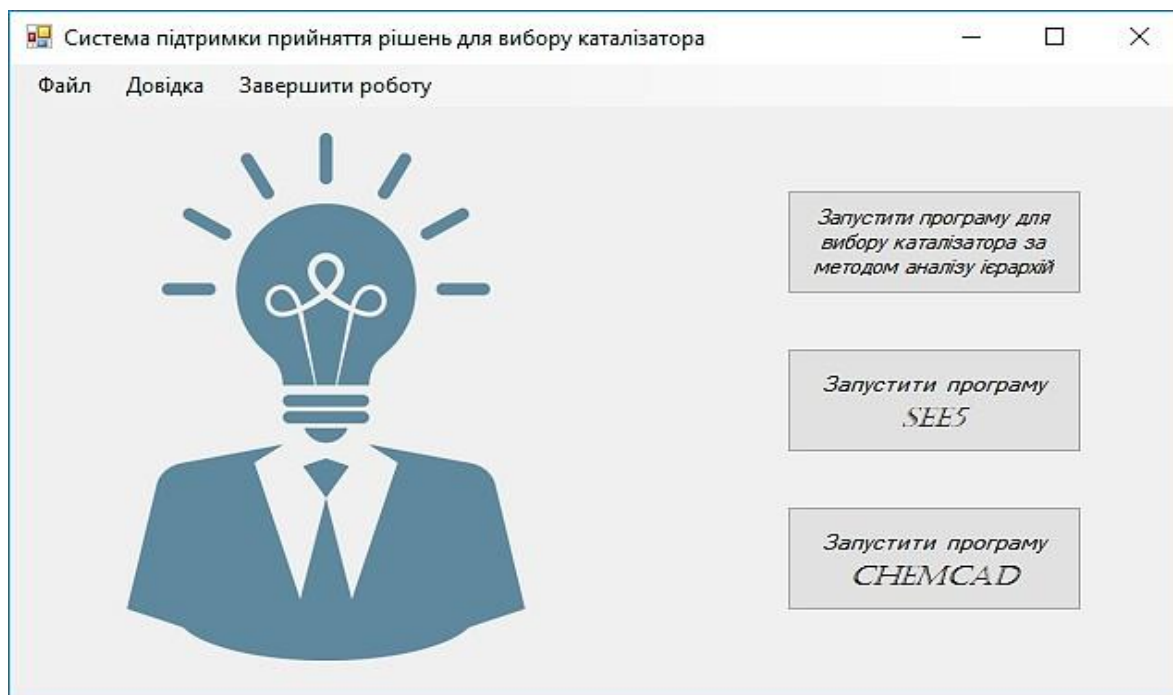


Рисунок 4.2 – Інтерфейс головного вікна СППР

Користувач має змогу переглядати документацію, відкривати бази даних, викликати інформаційні повідомлення про версію програми та розробників. Вихід з програми здійснюється через пункт меню або стандартним методом.

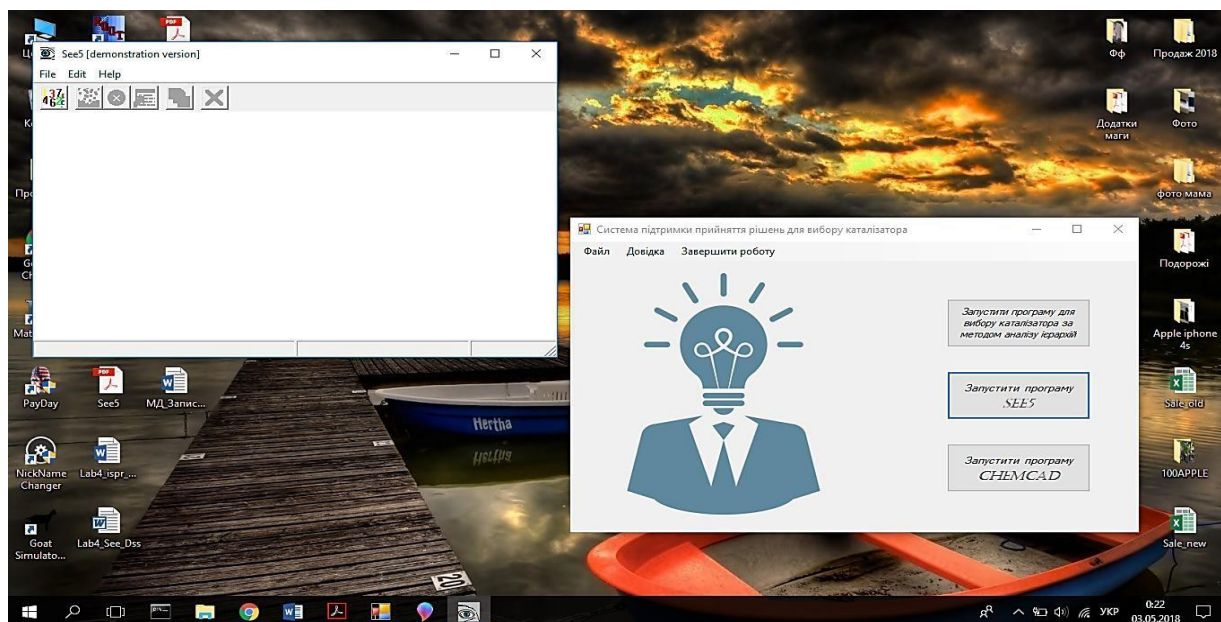


Рисунок 4.3 – Вікно запуску See5

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		43

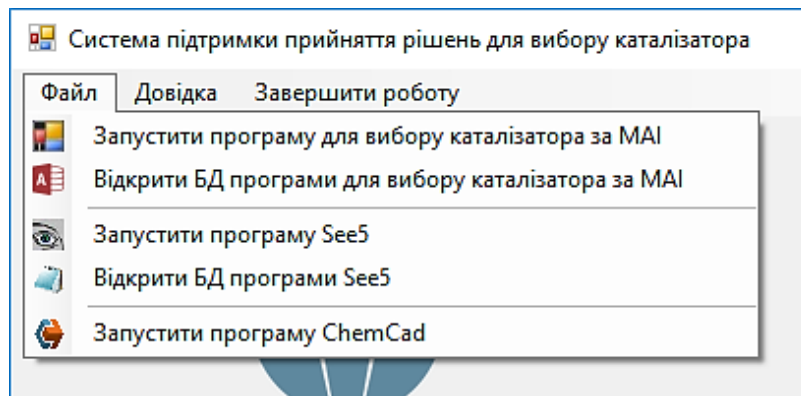


Рисунок 4.4 – Інтерфейс панелі «Меню»

Пункт меню «Файл» дублює функціональні можливості запуску основних програмних модулів, а також забезпечує доступ до відповідних баз даних для частини з них. Пункт меню «Довідка» виконує роль інформаційної підтримки користувача, забезпечуючи доступ до довідкових матеріалів щодо використання системи.

Натискання кнопки «Інструкція користувача» відкриває відповідне вікно (рис. 4.5), у якому наведено опис функціональних можливостей програмних компонентів, що реалізовані в межах системи підтримки прийняття рішень.

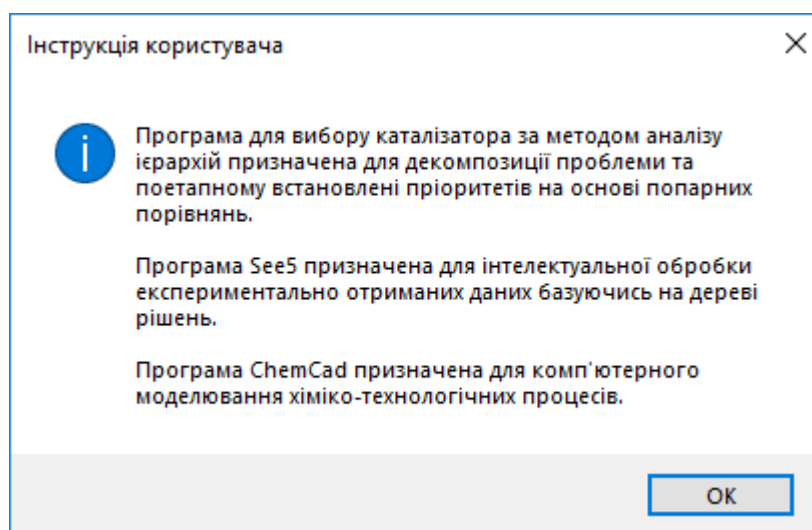


Рисунок 4.5 – Інформаційне вікно «Інструкція користувача»

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		44

Завершення роботи із системою можливе шляхом вибору пункту «Завершити роботу» у меню або стандартним способом — натисканням кнопки закриття вікна у верхньому правому куті інтерфейсу.

4.3 Застосування методу аналізу ієрархій для вибору каталізатора

Задача вибору каталізатора, який є ключовим компонентом забезпечення ефективного перебігу процесу окислювальної конденсації метану (ОКМ), розглядається як типова задача підтримки прийняття рішень. З огляду на це, доцільним є використання методу аналізу ієрархій (МАІ) як одного з найпоширеніших інструментів багатокритеріального оцінювання. Аналіз літературних джерел [1, 15] свідчить, що ефективність каталізаторів у процесі ОКМ визначається за такими п'ятьма критеріями:

1. температура проведення реакції;
2. конверсія метану (CH_4);
3. селективність утворення C_2 -вуглеводнів;
4. вихід C_2 -вуглеводнів;
5. швидкість реакції.

Загальна структура задачі вибору каталізатора може бути представлена у вигляді трирівневої ієрархії (рис. 4.6):

- *Мета* — формалізований опис основної задачі (вибір оптимального каталізатора);
- *Критерії* — кількісні або якісні характеристики, що використовуються для порівняння альтернатив;
- *Альтернативи* — варіанти каталізаторів, серед яких необхідно здійснити вибір.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		45

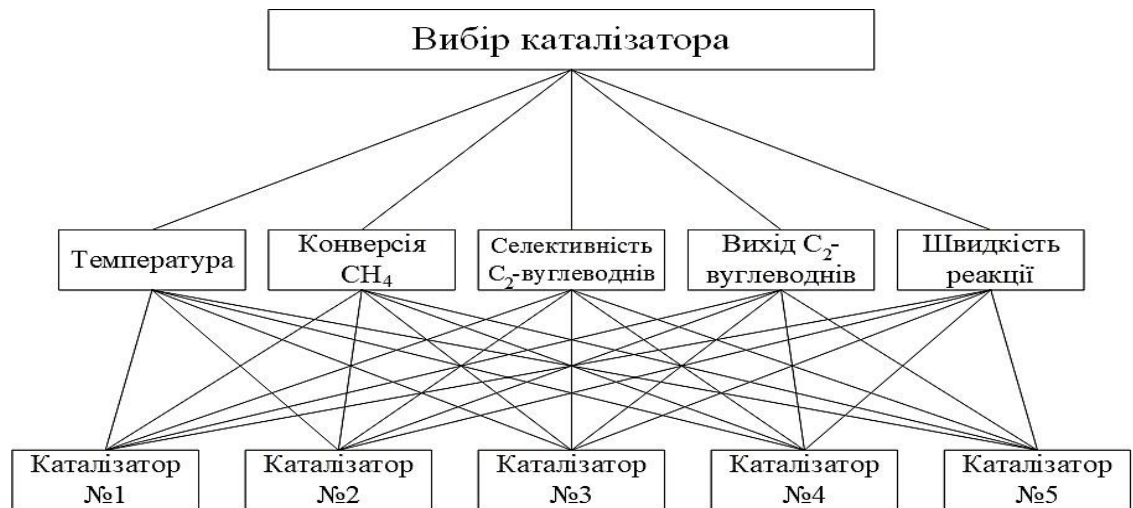


Рисунок 4.6 – Ієрархічна структура процесу вибору каталізатора

В таблиці 4.3 подано дані щодо основних каталізаторів, що досліджуються для процесу ОКМ, а також їх значення за відповідними критеріями.

Таблиця 4.3 – Каталізатори процесу окислювальної конденсації метану

Каталізатор	Температура, °C	Конверсія CH ₄ , %	Селективність C ₂ , %	Вихід C ₂ , %	Швидкість реакції, молек/м ² ·с
PbO/MgO	700	13,1	56,2	7,2	3×10 ¹⁹
Bi ₂ O ₃	800	21,0	66,8	14,0	6×10 ¹⁷
La ₂ O ₃	750	12,2	67,4	8,3	5,5×10 ²⁰
Nd ₂ O ₃ /MgO	770	26,0	46,0	11,2	1,2×10 ¹⁹
Ca-руда	870	28,0	77,5	22,2	2,7×10 ¹⁷
MgO	750	29,0	50,0	14,5	5×10 ¹⁶
Li/MgO	700	34,0	58,0	20,0	4×10 ¹⁷
LiCl/MnO ₂	750	47,2	64,7	30,8	7×10 ¹⁹
BaPbO ₃	800	22,0	62,7	14,0	4,5×10 ¹⁷
SrCe _{0.9} Yb _{0.1}	750	53,0	60,0	31,6	2,5×10 ¹⁹
Ba ₂ Sb(LaBi)O ₆	850	41,6	43,5	18,1	1×10 ¹⁹
KBi ₃ O ₄ F ₂	750	23,8	82,3	19,5	6×10 ¹⁷
LiCa ₂ Bi ₃ O ₄ Cl ₆	720	41,7	46,5	19,3	7×10 ¹⁷

Для реалізації методу аналізу ієрархій на кожному рівні структури формується матриця попарних порівнянь альтернатив за відповідними критеріями вищого рівня. Оцінювання виконується експертом або особою, що приймає рішення (ОПР), із використанням дев'ятибальної шкали Сааті.

Після побудови всіх необхідних матриць здійснюється розрахунок локальних та глобальних ваг альтернатив за допомогою відповідного програмного забезпечення, реалізованого на основі методу аналізу ієрархій.

4.4 Програмне забезпечення для вибору каталізатора на основі методу аналізу ієрархій

Розроблене програмне забезпечення призначене для визначення локальних і глобальних пріоритетів каталізаторів за заданими критеріями, їх графічного представлення, а також для формування рекомендацій щодо вибору оптимального каталізатора для процесу окисного конверсійного метанування (ОКМ) [15].

Структурна схема програмного забезпечення, реалізованого на основі методу аналізу ієрархій (MAI), подана на рисунку 4.7.

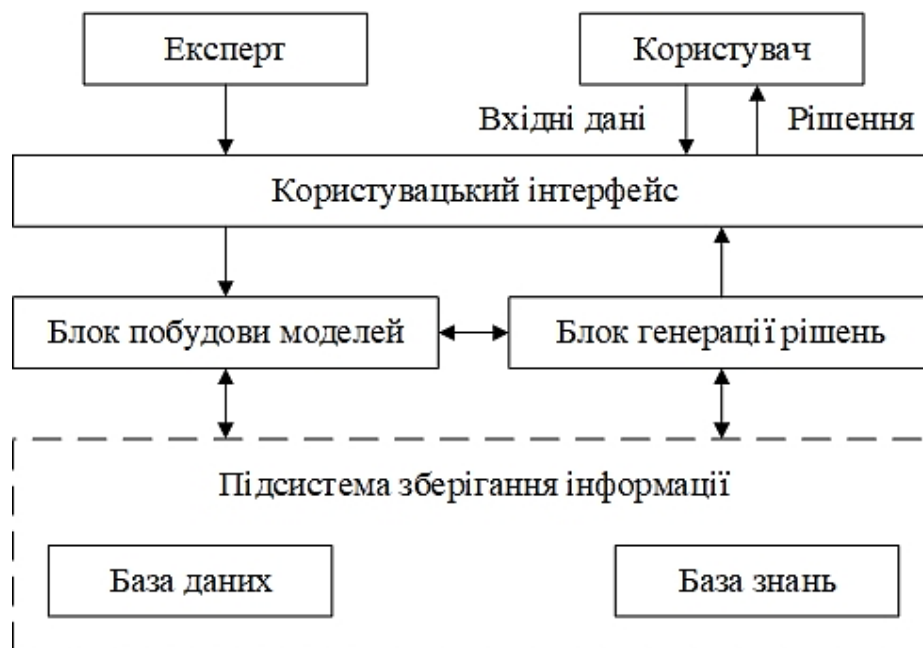


Рисунок 4.7 – Структура програми для вибору каталізатора за MAI

Згідно з рисунком 4.7, до основних структурних компонентів системи належать [10]:

1. *Експерт* — фахівець з глибокими знаннями та досвідом у галузі хімічних технологій.
2. *Користувач* — особа, яка приймає рішення щодо вибору каталізатора, оператор-технолог.
3. *Блок генерації рішень* — модуль, що пояснює механізм отримання результатів і формує рекомендації щодо вибору каталізатора.
4. *Блок побудови моделей* — реалізує алгоритми розрахунку на основі даних із бази знань і бази даних із застосуванням методу МАІ.
5. *Підсистема зберігання інформації* — включає базу знань (довгострокове збереження інформації для побудови моделей) та базу даних (оперативне збереження поточних і вхідних даних).

Після запуску відкривається головне вікно програми (рис. 4.8), яке містить три основні вкладки: «Головна», «База каталізаторів» і «Опис програми».

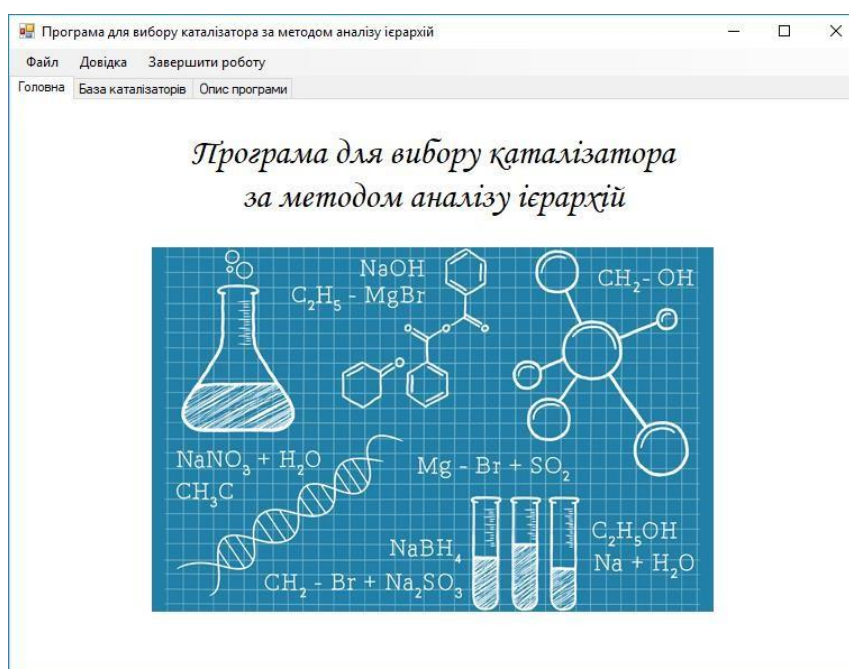


Рисунок 4.8 – Головне вікно програми

На вкладці «База каталізаторів» розміщено таблицю з наявними каталізаторами, а також основні елементи керування базою даних, зокрема кнопки імпорту, редагування, додавання та видалення записів (рис. 4.9).

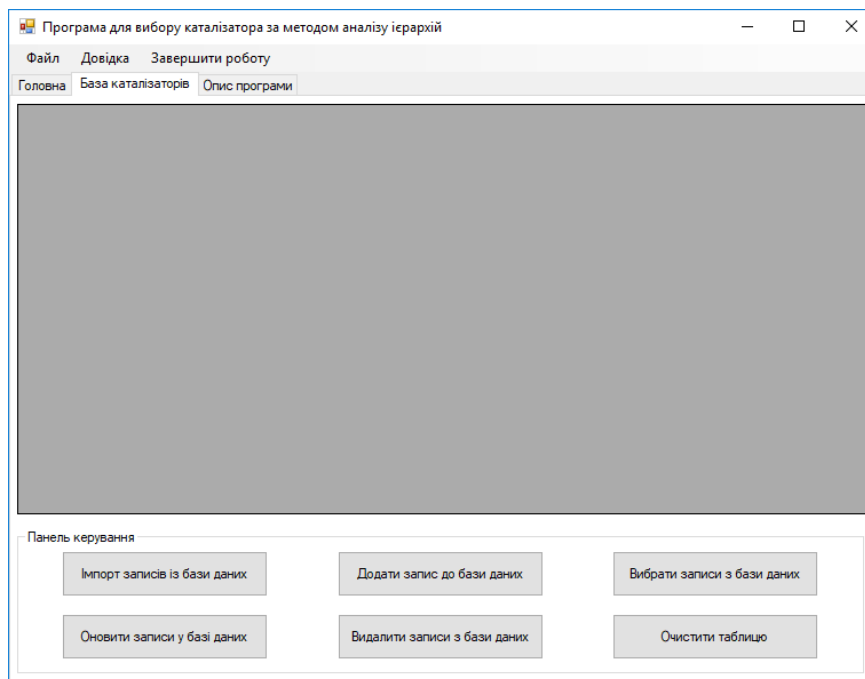


Рисунок 4.9 – Вікно управління базою даних (СУБД)

Для завантаження наявних записів з бази даних необхідно натиснути кнопку «Імпорт записів із бази даних», як продемонстровано на рисунку 4.10.

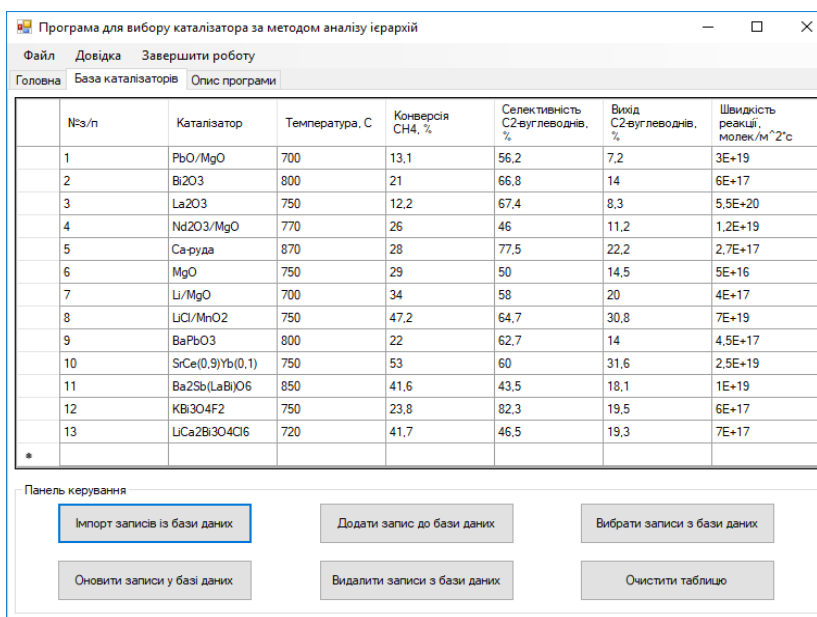


Рисунок 4.10 – Імпорт записів із бази даних

Редагування наявних записів здійснюється шляхом внесення змін безпосередньо в таблицю та натискання кнопки «*Оновити записи у базі даних*» (рис. 4.11).

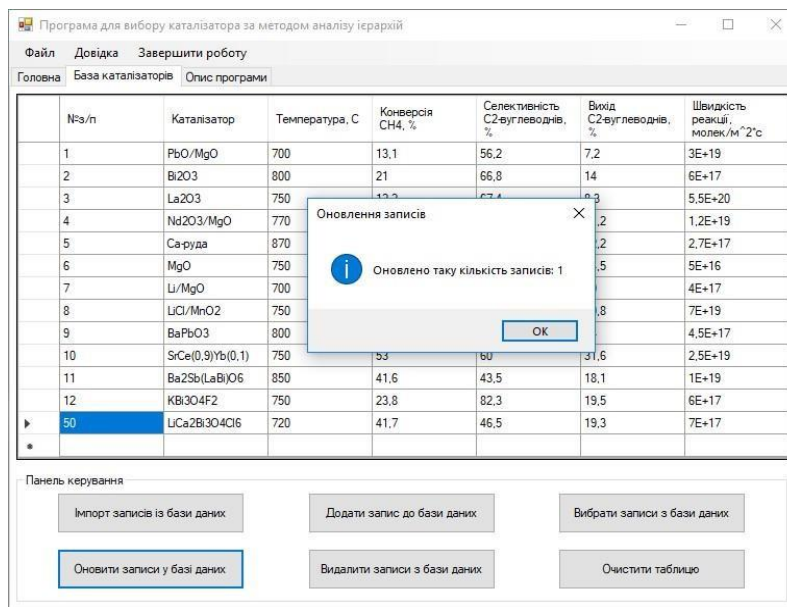


Рисунок 4.11 – Оновлення записів у базі даних

У разі відсутності змін під час спроби оновлення, система автоматично повідомляє користувача відповідним інформаційним повідомленням (рис. 4.12).

Для додавання нового запису до бази даних слід натиснути кнопку «*Додати запис до бази даних*». Після цього з'являється діалогове вікно для введення відповідних даних (рис. 4.12).

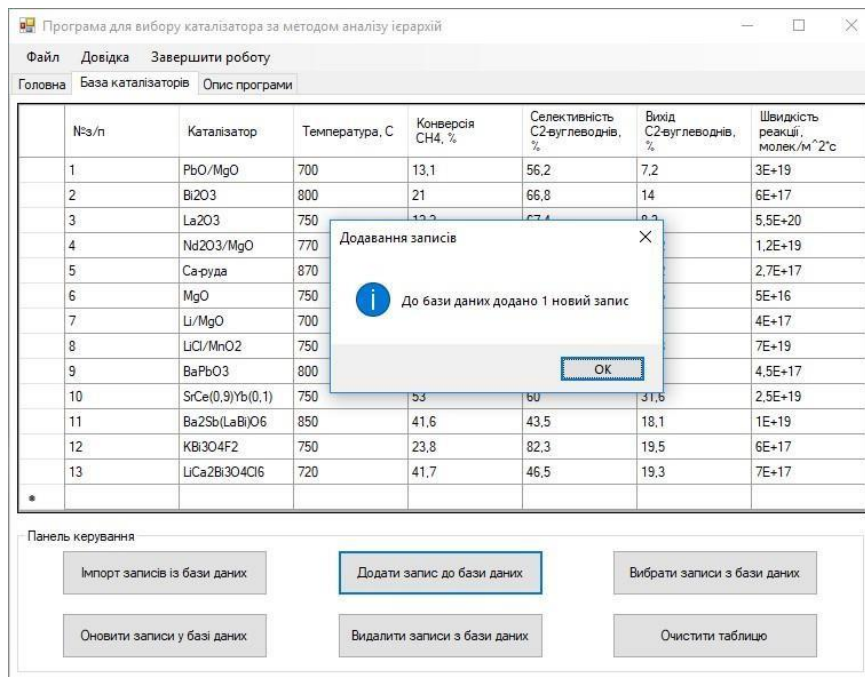


Рисунок 4.14 – Інформаційне повідомлення про успішне додавання запису

Для відображення доданого запису в таблиці інтерфейсу необхідно виконати оновлення даних, натиснувши кнопку «Очистити таблицю», а потім повторно здійснити імпорт записів із бази даних. Результати цього процесу наведено на рисунку 4.15.

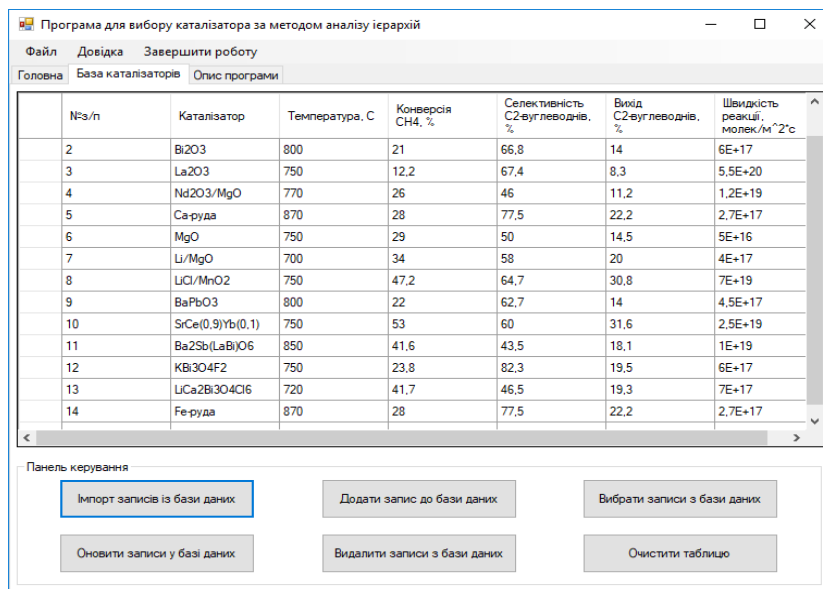


Рисунок 2.15 – База даних із доданим записом

Процедура видалення запису з бази даних реалізується через натискання кнопки «Видалити запис із бази даних» з подальшим заповненням відповідного діалогового вікна (рис. 4.16).

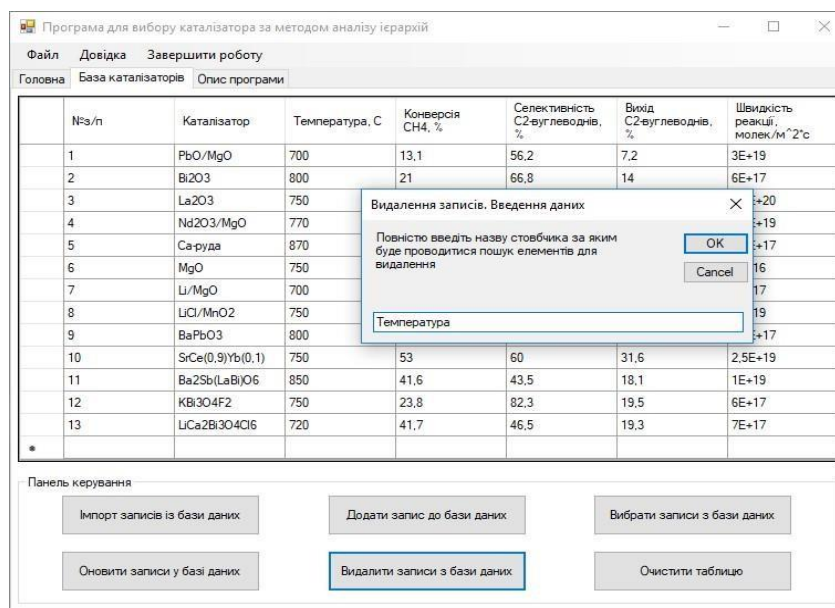


Рисунок 4.16 – Видалення запису з бази даних

Після успішного видалення обраного запису система автоматично виводить інформаційне повідомлення (рис. 4.17).

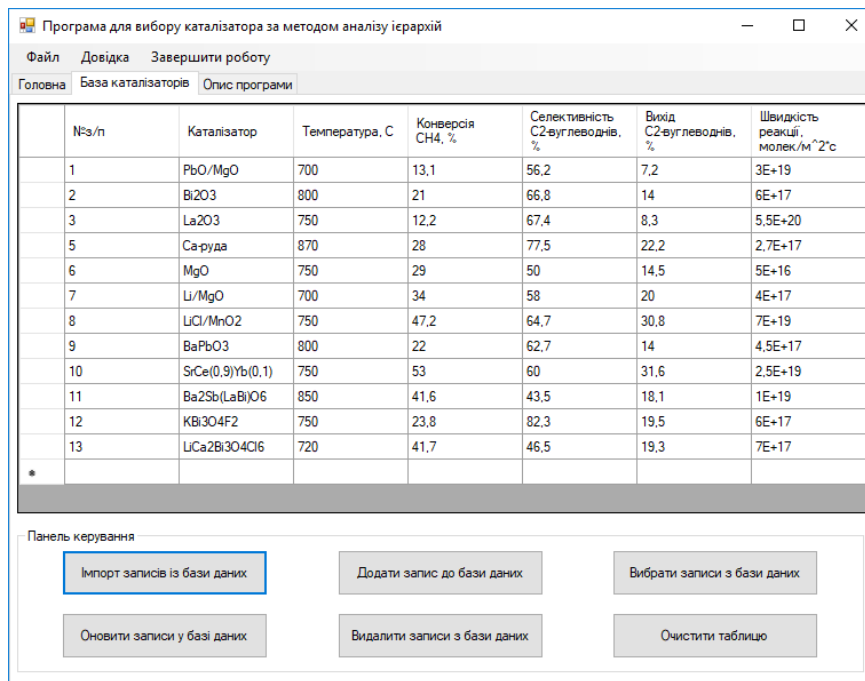


Рисунок 4.18 – База даних із видаленим записом

Для здійснення вибірки даних з бази необхідно активувати кнопку «Вибрати записи з бази даних» та заповнити відповідні діалогові поля, що з'являються (рис. 4.19).

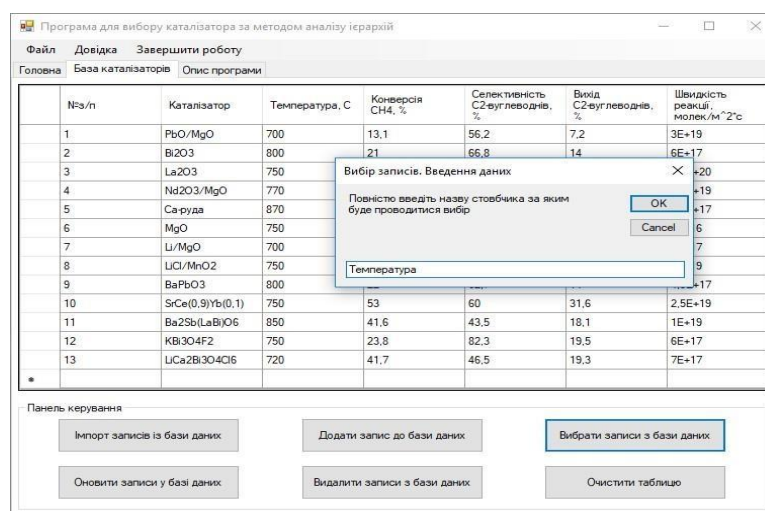


Рисунок 4.19 – Вибір записів із бази даних

Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата

На рисунку 4.20 наведено приклад результатів вибірки записів, здійсненої за критерієм «Температура» = 750.

№з/п	Каталізатор	Температура, С	Конверсія СН4, %	Селективність С2-вуглеводнів, %	Вихід С2-вуглеводнів, %	Швидкість реакції, молек/м ² *с
3	La2O3	750	12,2	67,4	8,3	5,5E+20
6	MgO	750	29	50	14,5	5E+16
8	LiCl/MnO2	750	47,2	64,7	30,8	7E+19
10	SiCe(0,9)Yb(0,1)	750	53	60	31,6	2,5E+19
12	KV3O4F2	750	23,8	82,3	19,5	6E+17

Рисунок 4.20 – База даних із відібраними записами

Вкладка «Опис програми» (рис. 4.21) містить загальні відомості щодо функціонального призначення програмного забезпечення, ієрархічну модель процесу прийняття рішення при виборі каталізатора, а також панель керування. На цій панелі розміщені основні функціональні елементи: «Почати роботу», «Інструкція користувача по роботі з СУБД», «Інструкція користувача по роботі з програмою», «Про програму».

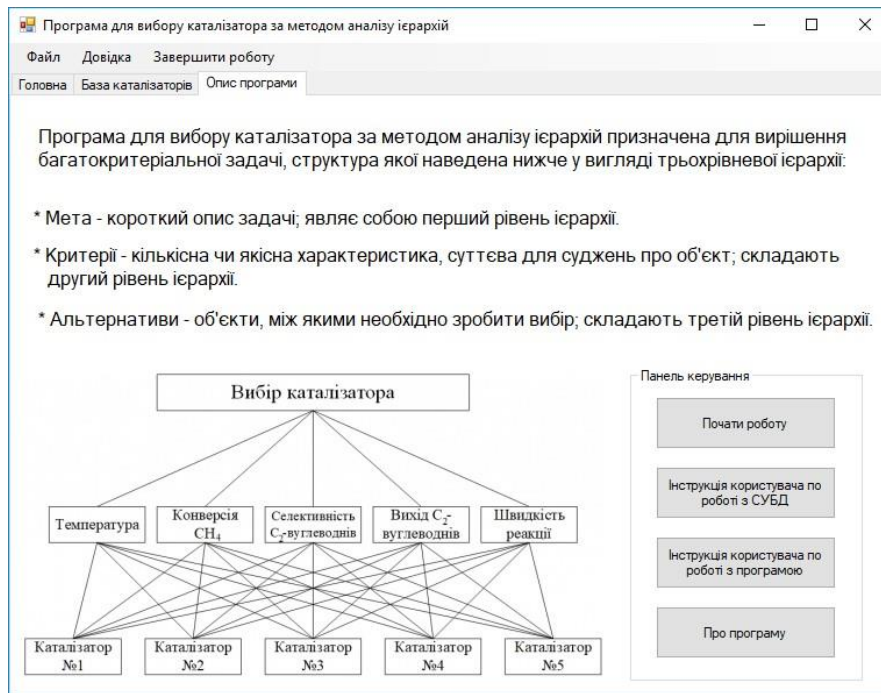


Рисунок 4.21 – Вкладка «Початкова інформація»

Для ініціалізації роботи з програмним забезпеченням користувачу необхідно активувати кнопку «Почати роботу». У відповідь на цю дію відкривається вкладка «Крок 1», зображена на рис. 4.22.

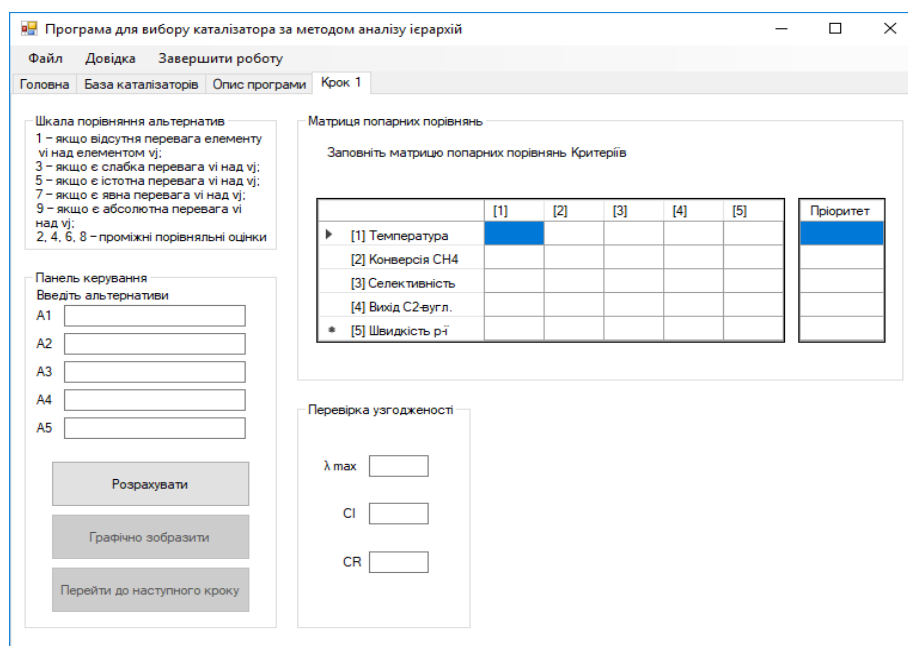


Рисунок 4.22 – Вкладка «Крок 1»

На цьому етапі користувач вводить альтернативи у відповідні поля, після чого заповнює матрицю попарних порівнянь, використовуючи шкалу Сааті. Для полегшення введення даних передбачено можливість автоматичного заповнення за замовчуванням шляхом натискання кнопок «*Меню*» та «*Ввести дані за замовчуванням*» (рис. 4.23).

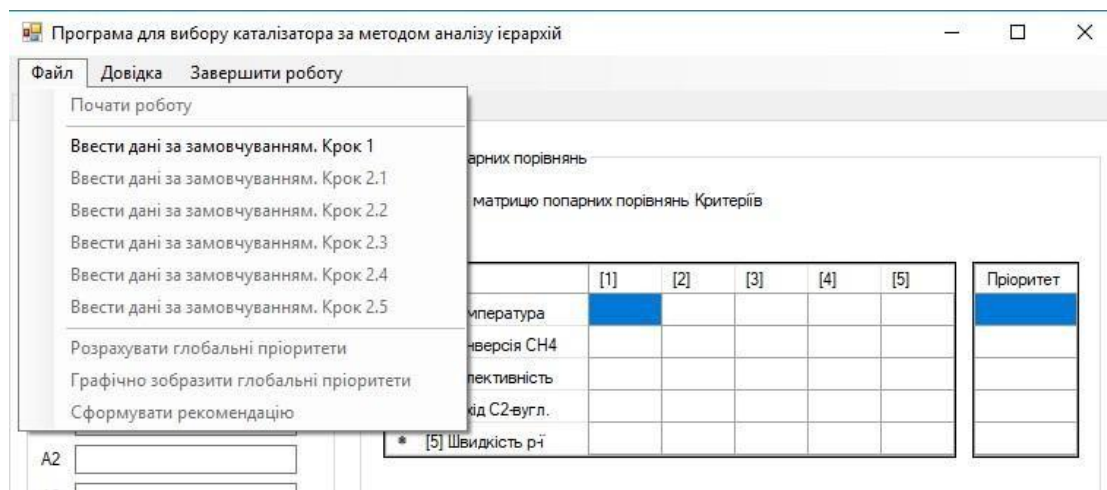


Рисунок 4.23 – Введення даних

Далі необхідно натиснути кнопку «*Розрахувати*», в результаті чого програма виконує обчислення локальних пріоритетів та супровідних величин, необхідних для перевірки узгодженості: максимального власного значення, індексу узгодженості та відношення узгодженості. У разі задовільного рівня узгодженості виводиться відповідне інформаційне повідомлення (рис. 4.24).

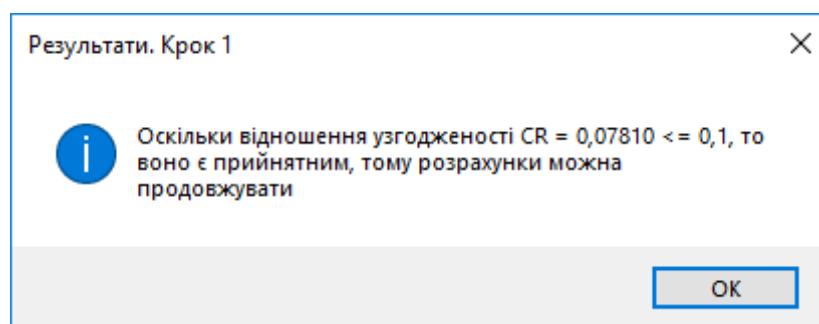


Рисунок 4.24 – Інформаційне вікно щодо допустимості результатів

Для візуалізації локальних пріоритетів необхідно скористатися кнопкою «Графічно зобразити». Вікно програми після виконання вказаної дії наведено на рис. 4.25.

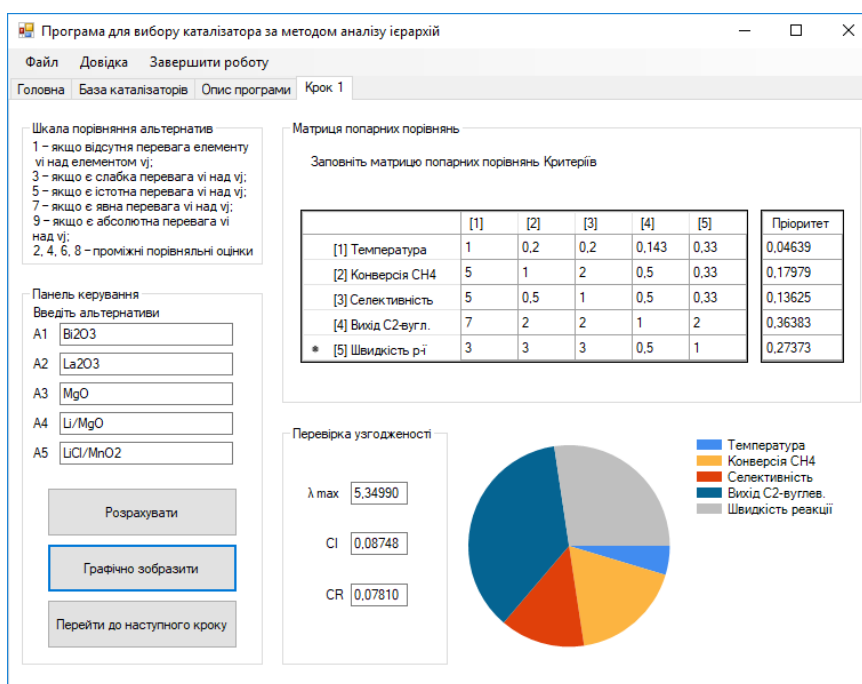


Рисунок 4.25 – Вікно обчислення локальних пріоритетів критеріїв

Після завершення першого етапу користувач натискає кнопку «Перейти до наступного кроку», унаслідок чого відкривається нова вкладка. Процедура введення та обчислень повторюється для наступних кроків (2.1–2.5), відповідно до заданих критеріїв. Результати обчислень відображено на рис. 4.26–4.30

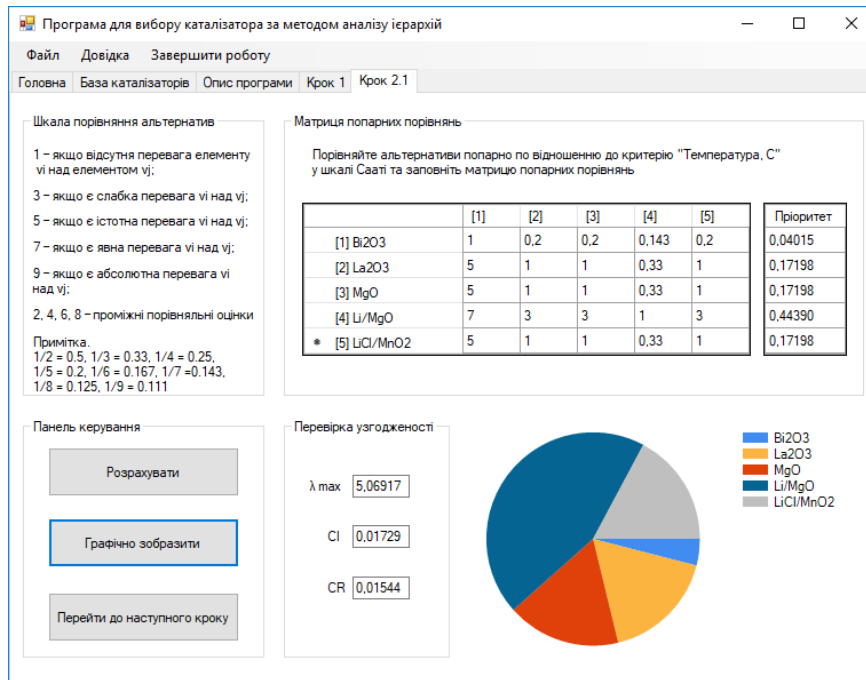


Рисунок 4.26 – Локальні пріоритети «Температура»

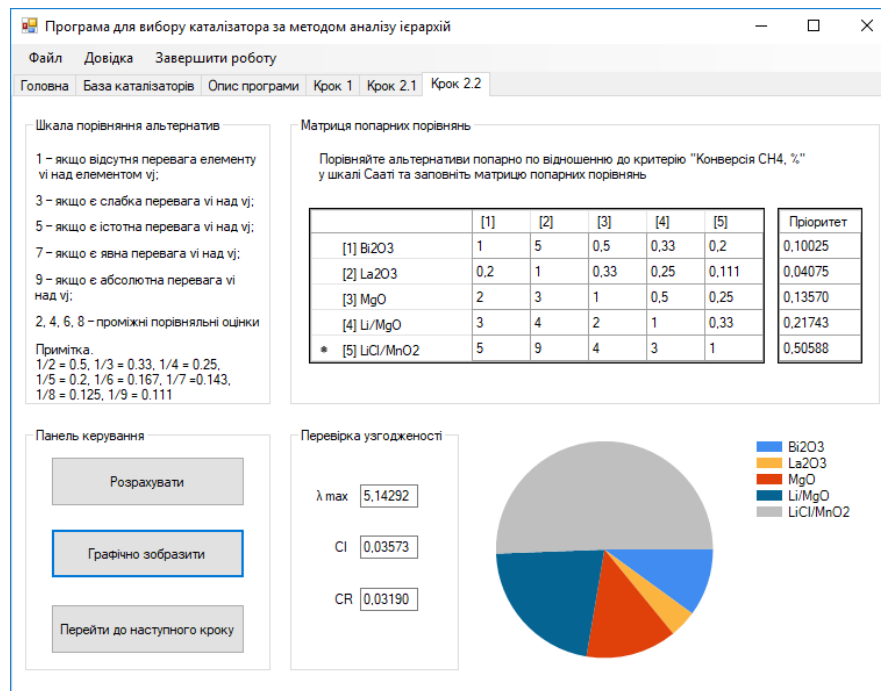


Рисунок 4.27 – Локальні пріоритети «Конверсія CH₄»

Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата

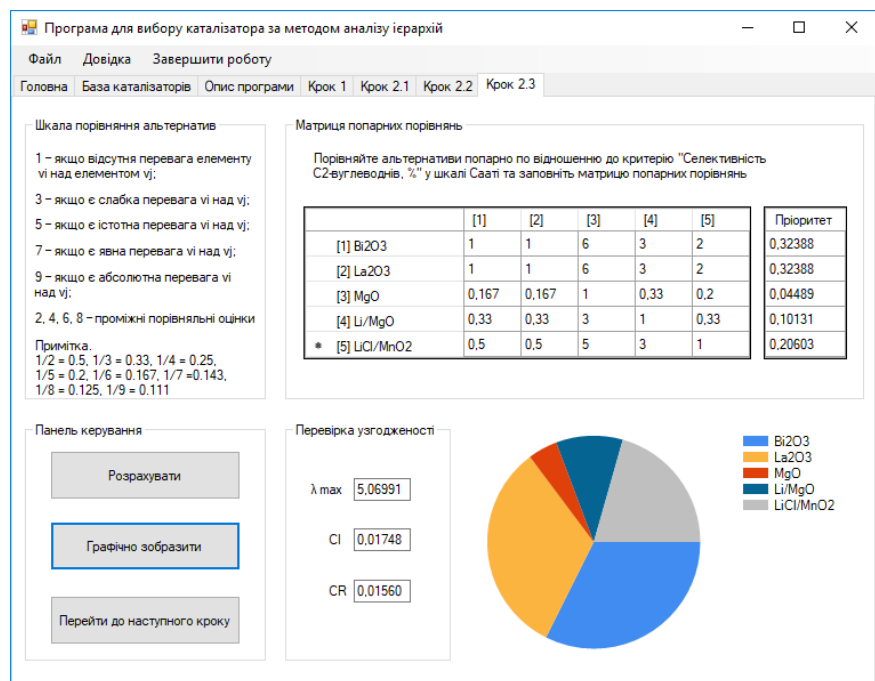


Рисунок 4.28 – Локальні пріоритети «Селективність С₂-вуглеводнів»

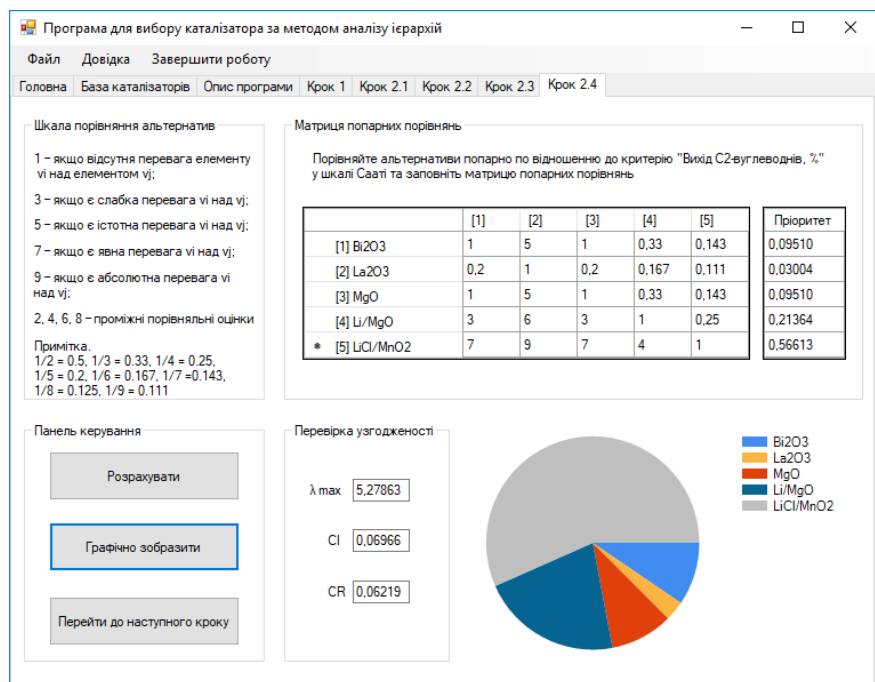


Рисунок 2.29 – Локальні пріоритети «Вихід С₂-вуглеводнів»

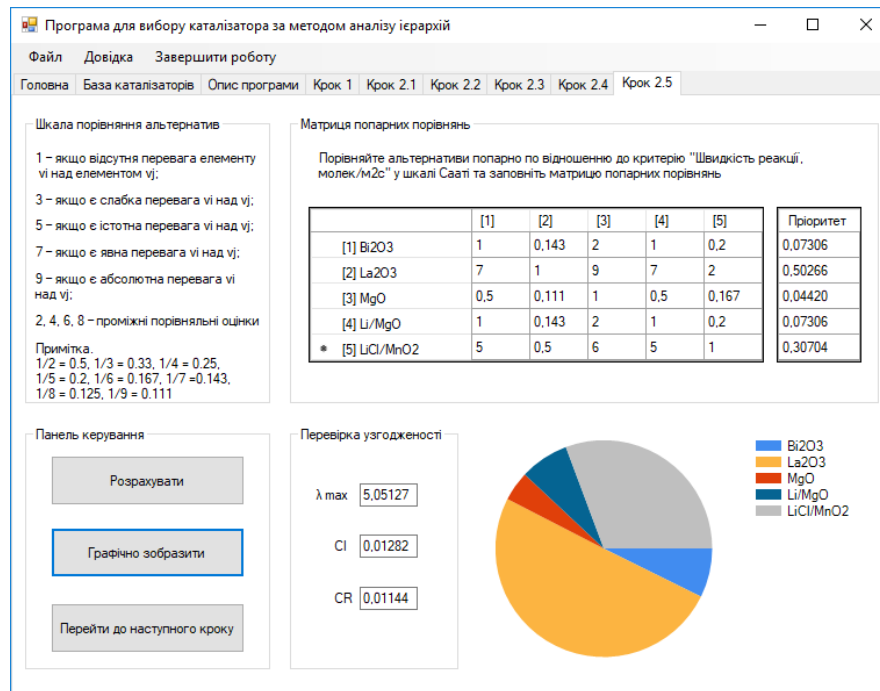


Рисунок 4.30 – Локальні пріоритети «Швидкість реакції»

Завершальним етапом є обчислення глобальних пріоритетів альтернатив для формування обґрунтованої рекомендації щодо вибору оптимального каталізатора. Для цього послідовно активуються кнопки «Розрахувати», «Графічно зобразити» та «Сформувати рекомендацію». Підсумкові результати наведено на рис. 4.31.

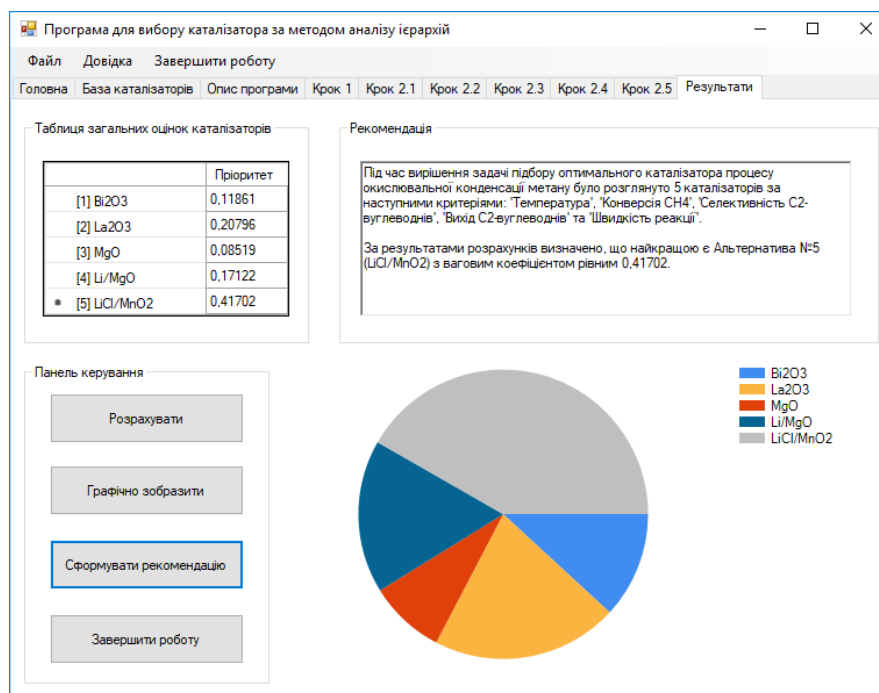


Рисунок 4.31 – Вікно глобальних пріоритетів

Згідно з результатами, відображеними на рис. 4.31, найвищий глобальний пріоритет отримала *Альтернатива №5* з ваговим коефіцієнтом 0.41702, яка відповідає каталізатору LiCl/MnO₂.

Висновок до розділу

У даному розділі розроблено інтелектуальну систему підтримки прийняття рішень (СППР) для вибору оптимального каталізатора, яка відображає основні завдання та результати магістерської дисертації. Рішення, сформовані за допомогою інтелектуальних компонентів СППР, надалі використовуються під час моделювання схеми окремих компонентів моделі (ОКМ). Розроблене програмне забезпечення може бути корисним як на етапах проектування та впровадження відповідного виробництва, так і безпосередньо в процесі експлуатації — зокрема, операторами-технологами під час керування технологічним процесом.

ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ

В результаті дослідження, присвяченого розробці інтелектуальної системи керування процесом конденсації метану, було досягнуто наступних результатів:

1. Обґрунтовано доцільність використання інтелектуальних підходів (зокрема, методів аналізу ієрархій, нечіткої логіки, алгоритмів прийняття рішень) для забезпечення ефективного управління складним та динамічним технологічним процесом, який характеризується нелінійністю, багатофакторністю та залежністю від зовнішніх збурень.
2. З огляду на каталітичну природу процесу оксидативного конденсації метану (ОКМ), при виборі каталізатора необхідно враховувати основні параметри реакції, зокрема: температуру, ступінь конверсії метану (CH_4), селективність до C_2 -вуглеводнів, вихід C_2 -продуктів, швидкість реакції тощо. Ці характеристики є визначальними для оцінювання ефективності каталізатора та формування оптимальних умов процесу.
3. Розроблено інтелектуальну систему підтримки прийняття рішень (СППР) для вибору каталізатора, яка включає два функціональні модулі. Перший базується на методі аналізу ієрархій (MAI) та передбачає участь експерта для побудови системи пріоритетів. Другий модуль реалізує підхід до автоматизованого вибору на основі методів інтелектуального аналізу даних у середовищі See5, без залучення фахівця. Ефективність системи була перевірена на прикладах вибору каталізаторів для процесу ОКМ.
4. Після проведення оцінки ефективності обраних каталізаторів було здійснено комп'ютерне моделювання варіантів технологічної схеми процесу ОКМ з використанням програмного комплексу ChemCad.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		64

Результати моделювання дозволили порівняти варіанти реалізації процесу та обґрунтовано вибрати оптимальну схему, яка забезпечує найкращі показники з точки зору техніко-економічних та екологічних критеріїв.

5. Запропоновану систему можливо адаптувати для суміжних технологічних процесів, що використовують гетерогенні каталізатори, з відповідним налаштуванням бази знань та цільових критеріїв оптимізації.

Таким чином, запропоноване рішення забезпечує підвищення ефективності керування процесом конденсації метану, зменшення ризиків прийняття нерациональних рішень та створює передумови для автоматизації процесів на базі сучасних цифрових технологій.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		65

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ НА ДЖЕРЕЛА

1. У "Карпатнафтохім" готуються запустити роботу підприємства навесні - уся надія на інвесторів [Електронний ресурс] : [Інтернет-портал]. – [Івано-Франківськ: Агенція новин Firtka.if.ua, 2017]. – Режим доступу: <http://firtka.if.ua/blog/view/u-karpatnaftohim-gotuutsa-zapustiti-robotu-pidpriemstva-navesni-usa-nadia-na-investoriv66560> (дата звернення: 15.04.2018). – Назва з екрана.

2. Виробництво етилену і поліетилену [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – [Івано-Франківськ: ТОВ “КАРПАТНАФТОХІМ”, 2017]. – Режим доступу: <http://www.knh.com.ua/production/virobnitstvo-etilenu-i-polietilenu/> (дата звернення: 15.04.2018). – Назва з екрана.

3. Fini T., Patz C., Wentzel R. Oxidative Coupling of Methane to Ethylene: Senior Design Reports [Текст] / T. Fini, C. Patz, R. Wentzel. – 2014. – 268 с.

4. Thybaut J. W., Marin G. B., Mirodatos C. A novel technology for Natural Gas conversion by means of integrated Oxidative Coupling and Dry Reforming of Methane [Текст] // Chemie Ingenieur Technik. – 2014. – Vol. 86, № 11. – P. 1855–1870.

5. Alexiadis V. I., Chaar M., van Veen A. Quantitative screening of an extended oxidative coupling of methane catalyst library [Текст] // Applied Catalysis B: Environmental. – 2016. – Vol. 199. – P. 252–259.

6. Nghiem Xuan Son. Ethylene Production by Oxidative Coupling of Methane: New Process Flow Diagram Based on Adsorptive Separation (Dissertation) [Текст] / Nghiem Xuan Son. – Berlin, 2014. – 142 с.

7. Семенцов Г.Н. Автоматичне управління: Навчальний посібник / Г.Н. Семенцов, Я.Р. Когуч, М.М. Дранчук і інші. – Івано-Франківськ: Факел, 2003.

8. Семенцов Г. Н. Теорія автоматичного керування. /Г. Н. Семенцов Івано-Франківськ; //Факел, 1999 – 610 с.

9. Stunkel S., Repke J.-U., Wozny G. Ethylene production via oxidative coupling

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		47

of methane (OCM) – investigation of alternative separation processes [Текст] // Czasopismo Techniczne. – 2008. – Vol. 105, № 5-M. – P. 285–291.

10. Система підтримки рішень [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Режим доступу: https://uk.wikipedia.org/wiki/Система_підтримки_рішень (дата звернення: 15.04.2018). – Назва з екрана.

11. Інформаційні технології та моделювання бізнес-процесів. Навч. посіб. [Текст] / О. М. Томашевський, Г. Г. Цегелик, М. Б. Вітер, В. І. Дубук.–К.: Видавництво «Центр учбової літератури», 2012. – 296 с.

12. Бугаєва Л. М., Бойко Т. В., Безносик Ю. О. Системний аналіз хіміко-технологічних комплексів: підручник [Текст] / Л. М. Бугаєва, Т. В. Бойко, Ю. О. Безносик. – Київ : Інтерсервіс, 2017. – 254 с.

13. C++ [Електронний ресурс] : [Веб-сайт]. – Режим доступу: <https://uk.wikipedia.org/wiki/C%2B%2B> (дата звернення: 15.04.2018). – Назва з екрана.

14. Мова C++ отримує високу оцінку за продуктивність завдяки новому стандарту ISO/IEC [Електронний ресурс] : [Інтернет-портал]. – [Інформаційне забезпечення у сфері технічного регулювання ДП "Укрметртестстандарт", 2016]. – Режим доступу: http://csm.kiev.ua/index.php?option=com_content&view=article&id=1056 (дата звернення: 15.04.2018). – Назва з екрана.

15. Плєскач В. Л., Затонацька Т. Г. Інформаційні системи і технології на підприємствах: підручник [Текст] / В. Л. Плєскач, Т. Г. Затонацька. – Київ : Знання, 2011. – 718 с.

16. Schapire R. E. The Boosting Approach to Machine Learning: An Overview [Текст] / R. E. Schapire. – New Jersey, 2002. – 23 p.

17. Michorczyk B., Hedrzak E. Study of Oxidative Coupling of Methane integrated with CO Oxidation [Текст] / B. Michorczyk, E. Hedrzak // Czasopismo Techniczne. – Cracow, 2017. – № 2. – P. 71–81.

					БР.АКП - 05.00.00.000 ПЗ	Арк.
Змн.	Арк.	№ докум.	Підпис	Дата		66