

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«СЕВАСТОПОЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ЭНЕРГИИ И ПРОМЫШЛЕННОСТИ

С.А. Федорова

**М О Д Е Л И Р О В А Н И Е
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
П Р О Ц Е С С О В.
КОНСПЕКТ ЛЕКЦИЙ**

Учебное пособие

Севастополь
СевГУ
2022

УДК 66.011(075.8)
ББК 35.11-642я73
Ф33

Р е ц е н з е н т :
Н.И. Черкашина - канд. техн. наук, доцент

Федорова С.А.

Ф33 Моделирование химико-технологических процессов. Конспект лекций: учебное пособие / С.А. Федорова; Севастопольский государственный университет, Институт ядерной энергии и промышленности. – Севастополь: СевГУ, 2022. – 182 с.: ил. – Текст : электронный.

Рассмотрены вопросы построения математических моделей в химической технологии, оптимизация процессов.

Предназначено для студентов 4-го курса направления подготовки «Химическая технология».

УДК 66.011(075.8)
ББК 35.11-642я73

Рассмотрено и рекомендовано к изданию на заседании ученого совета Института ядерной энергии и промышленности, протокол № 8 от 26 апреля 2022 г.

© ФГАОУ ВО «Севастопольский
государственный университет», 2022

ОГЛАВЛЕНИЕ

Вводная лекция.

Лекция № 1. Математическое моделирование как основной метод решения задач химической технологии 5

1. Предмет моделирования химико-технологических процессов. Цель и задачи курса 6
2. Классификация моделей 9
3. Физическое моделирование 14
4. Особенности химических систем 16
5. Математическое моделирование 19
- Вопросы самоконтроля 29

Лекция № 2. Основные этапы составления математической модели объектов химической технологии 32

1. Физическое описание природы объекта 32
2. Схема построения математической модели химико-технологического процесса на основе физического описания природы 44
3. Основные этапы разработки математической модели 45
 - 3.1. Постановка задачи моделирования: выбор цели и критериев 45
 - 3.2. Постановка задачи моделирования: формулирование задачи и выбор параметров процесса 47
 - 3.3. Составление математического описания 47
 - 3.4. Составление алгоритма и реализация его в виде моделирующей программы 50
 - 3.5. Установление адекватности модели объекту 51
 - 3.6. Использование математической модели 54
4. Этапы вычислительного эксперимента. Компьютерное моделирование 55
- Вопросы самоконтроля 62

Лекция № 3. Химико-технологическая система как объект регулирования 64

1. Основные понятия и определения кибернетики 64
2. Информация. Элементы теории информации 67
3. Объект регулирования 69
4. Основные этапы управления объектом ХТС 73
- Вопросы самоконтроля 83

Лекция № 4. Уравнения математической модели 85

1. Типы математических моделей 85
2. Граничные условия 87

3. Пространственно-временная классификация процессов и моделей химической технологии	90
4. Графы. Использование графов в химической технологии	95
5. Структурный анализ при расчете ХТС	101
Вопросы самоконтроля	113
Лекция № 5. Основные типы моделей химико-технологических процессов	116
1. Модели РИС и РИВ	116
2. Однопараметрическая диффузионная гидродинамическая модель	118
3. Двухпараметрическая диффузионная модель	120
4. Ячеечная и комбинированные модели	121
5. Типовые уравнения основных процессов ХТС	124
6. Общая характеристика имитационного моделирования	126
Вопросы самоконтроля	133
Лекция № 6. Методы оптимизации в химической технологии	135
1. Оптимизация. Критерий оптимальности	135
2. Методы поиска экстремума (оптимизации)	144
2.1. Классические методы	145
2.2. Методы поиска экстремума унимодальных функций	150
2.3. Методы случайного поиска	159
3. Вариационное исчисление	161
Вопросы самоконтроля	169
Заключительная лекция	172
Литература	178

ВВОДНАЯ ЛЕКЦИЯ

Л е к ц и я № 1

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КАК ОСНОВНОЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Научно-технический прогресс основан на тесной взаимосвязи теории и эксперимента. Чем быстрее развивается теория и чем больше накапливается научной информации, тем быстрее должны развиваться экспериментальные методы и тем более тонкими и обобщающими они должны быть. Эксперимент был и остается существенным инструментом познания. Для инженера эксперимент не только облегчает подход к изучению той или иной проблемы, но и является средством конкретного решения технических задач.

Роль эксперимента усиливается еще и тем, что он нередко помогает найти наилучший подход к аналитическому решению.

Основой для постановки опытов самых разнообразных направлений и проведения экспериментальных исследований процессов является моделирование в различных его видах. Более того, моделирование создает предпосылки для наиболее целесообразного сочетания теории и эксперимента в научных исследованиях.

Основные проблемы и направления атомной энергетики химической технологии включают фундаментальные исследования гидродинамики, тепло- и массообмен сложных химических систем при больших скоростях, высоких давлениях и температурах; расширение исследований кинетики химических реакций, осложненных явлениями переноса тепла и массы, а также фазового равновесия, особенно многокомпонентных систем; исследования в целях создания высокоинтенсивных массообменных аппаратов, химических ректоров и целых агрегатов большой единичной мощности и др. Выявление резервов производства или конкретного процесса связано с его анализом на основе современных методов исследования и современных технических средств, в частности ПК.

При этом особое внимание уделяется химико-технологическим моделям процессов и способам их построения. Для анализа механизма явлений и эффективного управления производственными процессами необходимо выявить в количественной форме взаимосвязи между факторами, определяющими ход процесса.

Ограниченность аналитического подхода к построению моделей может быть вызвана не только сложностью процесса и трудностями описания. В реальных условиях проявляется много неучтенных факторов, которые не поддаются контролю и, изменяясь во времени, выступают как

внешние и внутренние случайные возмущения. Поэтому рассмотрены различные аспекты математического моделирования реальных технологических процессов, действующих в условиях случайных возмущений. Приведены методы экспериментально-статистического исследования (идентификации) химико-технологических процессов как объектов управления. Эти методы удобны тем, что позволяют изучать процессы в условиях нормального функционирования объекта.

Большинство процессов химической технологии имеют двойственную детерминированно-стохастическую природу. Исходя из этого, рассмотрены экспериментальные методы исследования структуры потоков, позволяющие учесть стохастическую составляющую процесса. Рассматриваются типовые модели структуры потоков в аппарате: модель идеального перемешивания; модель идеального вытеснения; диффузионная модель.

Изложены вопросы оптимизации и оптимального управления технологическими процессами с учетом их динамических свойств. Реализация задач оптимизации предусматривает выбор такого технологического режима, при котором некоторые критерии, характеризующие качество управления, достигают экстремальных значений. Решение задач такого рода, заключающееся в нахождении оптимального алгоритма поведения системы, позволяет определить оптимальную структуру системы для каждого случая. Однако из-за ограничений информации об объектах управления удается реализовать только субоптимальные системы, параметры которых отличаются от оптимальных.

1. Предмет моделирования химико-технологических процессов. Цель и задачи курса

Предметом математического моделирования являются объекты химической технологии, изучение их свойств на математической модели, в целях определения оптимальных условий протекания процесса, управление объектом на основе математической модели и перенос результатов на моделируемый процесс.

На современном этапе успешное решение поставленных задач возможно на основе использования методов и средств кибернетики.

Поэтому особое значение имеют исследования по составлению математических моделей с учетом достижений химической кибернетики, оптимизации и управлению отдельными химико-технологическими процессами и химико-технологическими системами, что неразрывно связано с усовершенствованием химико-технологического образования и подготовкой высококвалифицированных кадров.

Выполнение расчетов на ПК в значительной мере устраняет трудности, возникающие при решении многих задач химической технологии. Ме-

тоды оптимизации стали составной частью технологических расчетов, эффективное применение которых требует построения математического описания исследуемого процесса.

Целью курса является:

- рассмотрение теоретических основ и принципов протекания химико-технологических процессов в качестве базиса математического моделирования, определяющего подготовку инженеров;

- изучение математического моделирования химико-технологических процессов как составной части общехимической подготовки специалистов;

- применение методов решения сложных многофакторных задач в химической технологии;

- применение математического моделирования к анализу и расчету технологических процессов, аппаратов и агрегатов;

- формирование у студентов знаний по теоретическим основам и методике применения ПК при реализации математических моделей, необходимых для усвоения специальных дисциплин в подготовке специалистов атомной энергетики;

- привитие навыков по основным принципам составления математических моделей, основанные на знании особенностей технологических режимов, умения анализировать полученные в ходе эксперимента результаты и корректировать на основе полученных данных изучаемую модель;

- ознакомление студентов:

- с аналитическими, экспериментальными и экспериментально-аналитическими методами составления описания химических процессов;

- с методами планирования и проведения химического эксперимента;

- с типовыми моделями химических реакций, реакторов, структуры потоков.

Это обуславливается:

- большими успехами химической науки, решившей многие проблемы переработки продуктов природы в продукты потребления;

- возросшим уровнем химической технологии и техники производства;

- расширением возможностей в области химического машиностроения и приборостроения;

- получением материалов, обладающих повышенной прочностью, термостойкостью, коррозионной стойкостью и другими качествами;

- возросшим уровнем технических знаний ИТР и рабочих.

«Сегодня инженер не просто аппаратчик с высшим образованием, который полагается лишь на свой опыт и интуицию, а действительный руководитель производства, имеющий в качестве советчика и помощника управляющую вычислительную машину» (В.В. Кафаров). Чтобы стать таким инженером, необходимо овладеть методами кибернетики в химии и химической технологии.

Применение методов и средств кибернетики в химической промышленности, составляющих сущность химической кибернетики, изучение и знание которой позволит решать следующие *задачи*:

1. Оптимальное проектирование новых и интенсификация действующих производственных процессов путем составления, исследования их математического описания и оптимизации технологических режимов.

2. Контроль за ходом процесса, получение необходимой информации о нем и переработка этой информации. Информация может поступать прямо в управляющие устройства, которые автоматически корректируют возникшие отклонения от нормального хода процесса. Это база для создания химических заводов-автоматов.

3. Максимальное ускорение переноса результатов лабораторных исследований и технологических схем в промышленность.

4. Решение сложных вычислительных задач в научных исследованиях и реализации процессов, которые невозможно проводить без применения методов кибернетики, ввиду возникающих вычислительных или других трудностей.

Поэтому *основные задачи курса*, которые предстоит решить нам с вами вместе, это:

- синтез и анализ знания теоретических основ и принципов протекания химико-технологических процессов в качестве базиса математического моделирования;

- умение грамотно формулировать задачу, результатом чего является формализованное описание объекта;

- овладение техникой работы с пакетами прикладных программ;

- выработка навыков по составлению математического описания объектов химической технологии и их решению.

Изучение курса предусматривает работу на ПК в целях овладения техникой работы с пакетами прикладных программ. Традиционной формой применения ПК является выполнение трудоемких расчетов этапов моделирования объектов химической технологии. Кроме того, предполагается использование ПК при самостоятельной работе студентов над лекционным материалом для обеспечения самоподготовки, консультаций, отладки программ моделирования объектов химической технологии.

Изложение материала предполагает, что обучаемые уже знакомы с основами гидравлики, термодинамики, тепло- и массопередачи, химической кинетики и вычислительной техники, применительно к решению инженерных задач.

От специалиста, занимающегося построением моделей, требуются следующие основные качества:

- четкое представление о сущности физико-химических явлений, протекающих в объекте;

- умение математически описывать протекающие процессы и применять методы моделирования;

- уметь обеспечить получение на модели содержательных результатов.

Предлагаемая им модель должна строиться так, чтобы она наиболее полно воспроизводила те качества объекта, которые необходимо изучить в соответствии с поставленной целью. Во всех отношениях модель должна быть проще объекта и удобнее его для изучения. Таким образом, для одного и того же объекта могут существовать различные модели, классы моделей, соответствующие различным целям его изучения.

Необходимое условие моделирования - подобие объекта и его модели.

Требования к модели

1. Затраты на создание модели должны быть значительно *меньше затрат* на создание оригинала.

2. Должны быть четко определены *правила интерпретации* результатов вычислительного эксперимента.

3. Основное требование - модель должна быть *существенной*. Это требование заключается в том, что модель должна отражать необходимые, существенные для решения конкретной задачи свойства объекта. Для одного и того же объекта сложно создать обобщенную модель, отражающую все его свойства. Поэтому важно обеспечить существенность модели.

2. Классификация моделей

Методы моделирования базируются на *подобии* различных объектов. Один из двух объектов, между которыми существует подобие, принято называть объектом моделирования (оригиналом), а другой - его моделью.

В настоящее время моделирование используется при исследованиях в самых различных областях науки и техники.

Широкое применение моделей объясняется тем, что модель дает возможность установить в каждом явлении, объекте, процессе те основные закономерности, которые присущи этим явлениям, объектам, процессам, и пренебречь второстепенными, вспомогательными признаками. Существует несколько классификаций моделей.

Один из существенных признаков классификации связан с отражением в математической модели тех или иных особенностей технологического объекта. Например, если математическая модель отображает устройство технологического объекта и связи между составляющими его элементами, то ее называют структурной математической моделью. Если математическая модель отражает происходящие в технологическом объекте механические или информационные процессы, то ее относят к функциональным моделям.

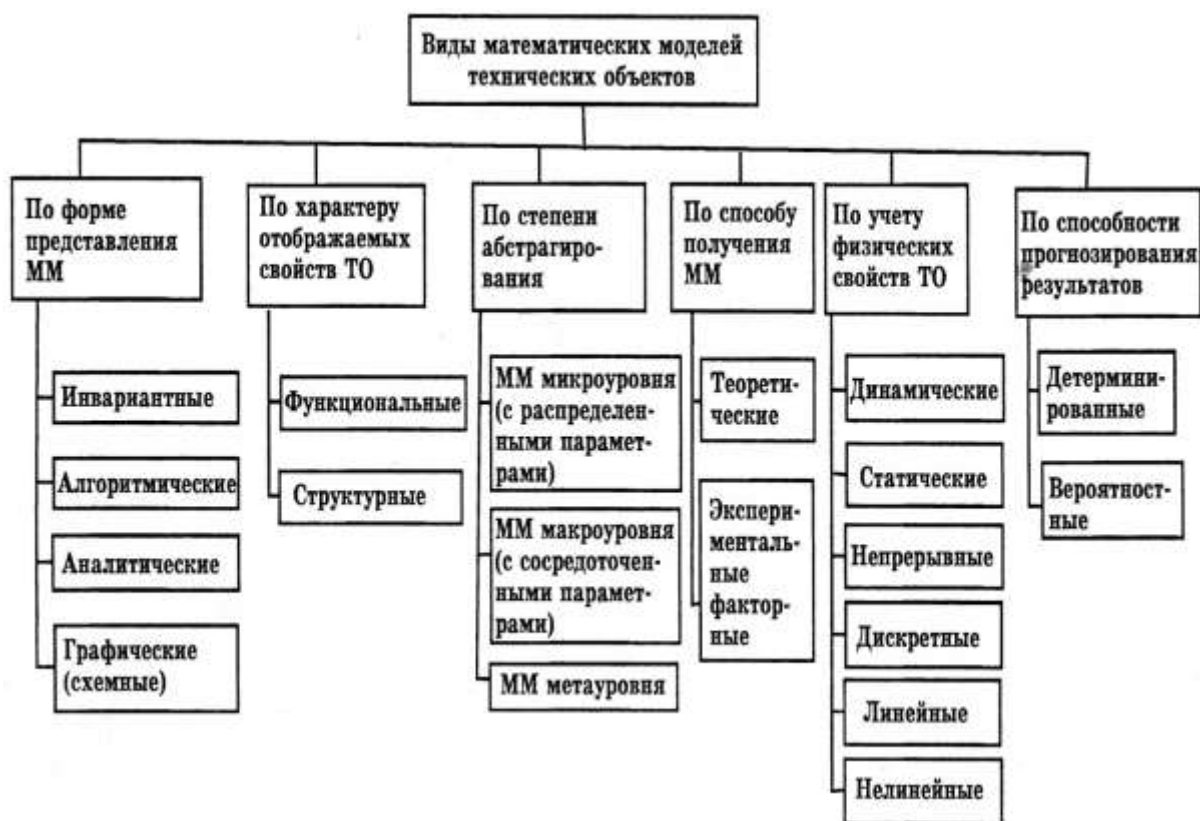


Рис. 1.1. Пример классификации математических моделей технических объектов

Структурные математические модели делят на топологические и геометрические, составляющие два уровня иерархии математической модели этого типа. Первые отображают состав технологического объекта и связи между его элементами. Топологическую математическую модель целесообразно применять на начальной стадии исследования сложного по структуре технологического объекта, состоящего из большого числа элементов, прежде всего для уяснения и уточнения их взаимосвязи. Такие математические модели имеют форму графов, таблиц, матриц и т.п. Их построению обычно предшествует разработка структурной схемы технологического объекта.

Геометрические математические модели дополнительно к информации, представленной в топологической модели, содержат сведения о форме и размерах технологического объекта и его элементах, об их взаимном расположении. Геометрические модели находят применение при проектировании технологического объекта, разработке технической документации и технологических процессов изготовления его элементов.

Описать поведение сложного технологического объекта или системы одной математической моделью, как правило, не удастся, а если такая математическая модель и была бы построена, то она оказалась бы слишком сложной для количественного анализа. Поэтому к таким технологическим объектам обычно применяют главенствующий принцип системного анали-

за – принцип декомпозиции. Он состоит в условном разбиении технологического объекта на отдельные более простые блоки (подсистемы) и элементы, допускающие их независимое исследование с последующим учетом взаимного влияния блоков и элементов друг на друга. В таком случае возникает иерархия математической модели связанных между собой блоков и элементов. Иерархические уровни выделяют и для отдельных типов математической модели.

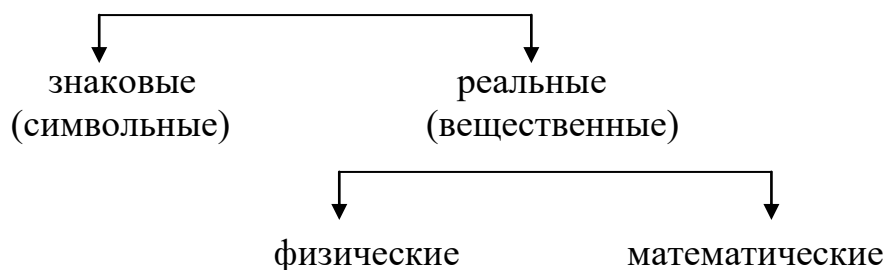
Классификацию моделей можно проводить и по другим признакам.

Т а б л и ц а 1.1

Классификация моделей по различным типам признаков

Тип признака	Модели
Природа моделей	Реальные Знаковые
По полноте отражения внутренних свойств объекта	Динамические Статические
По используемому математическому аппарату	Детерминированные Статистические
По форме представления	Мысленные Материальные

По природе моделей: реальные (физические/математические) и знаковые.



Знаковые (символические) модели являются математическим описанием процессов, явлений, объектов и обычно называются математическими моделями. Для построения таких моделей и выполнения операций над ними используются различные разделы математики (дифференциальное исчисление, математическая статистика, теория графов и др.).

При составлении знаковых (символических) моделей математический аппарат должен обеспечивать наиболее полное выражение свойств моделируемого объекта и поэтому его выбор определяется характером и сложностью изучаемой системы.

Применительно к химической технологии под математической моделью (знаковой или символической) понимается совокупность математиче-

ских зависимостей, отражающих в явной форме сущность химико-технологического процесса и связывающих его физические, режимные, физико-химические, а также конструктивные параметры.

Реальные (вещественные) модели, которые являются физическими объектами, подразделяются на физические и реальные математические. Физическая модель имеет одинаковую с изучаемым объектом физическую природу и воспроизводит все его свойства, которые рассматриваются при разработке модели. Реальная математическая модель отличается по физической природе от исследуемого процесса, но их математическое описание (знаковые модели) идентичны.

Самыми универсальными моделирующими устройствами (реальными математическими моделями) являются средства современной вычислительной техники - ЭВМ.

По полноте отражения внутренних свойств объекта моделирования модели подразделяют на динамические и статические.

Динамические модели, в основном, используются при разработке систем автоматизированного управления процессами, так как они учитывают переходные характеристики объекта.

Статические - описывают стационарные (установившиеся) процессы.

По используемому математическому аппарату математические модели подразделяются на детерминированные и стохастические.

Детерминированными называются процессы, в которых определяющие величины изменяются непрерывно по вполне определенным закономерностям. При этом предполагается, что значения выходных величин, характеризующих процесс (параметры состояния), однозначно определяются заданием входных и управляющих воздействий.

Примером детерминированного процесса может служить процесс, протекающий в проточном реакторе с мешалкой, в котором достигается равномерное перемешивание.

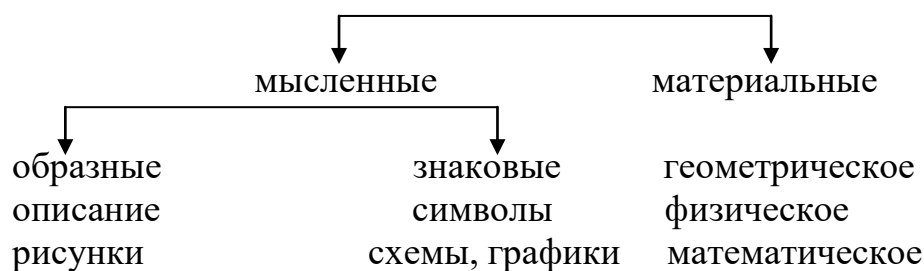
Стохастическими называются процессы, в которых изменение определяющих величин происходит случайным образом. При этом значения выходных величин находятся в вероятностном соответствии с входными и не определяются ими однозначно.

Примером стохастического процесса может служить контактно-каталитический процесс, в котором выход продукта изменяется с изменением активности катализатора в зависимости от старения его во времени.

По форме представления модели можно подразделить на мысленные и материальные.

Мысленная модель - отображение оригинала, отражающая существенные черты объекта и возникающая в сознании человека в процессе познания.

Образные модели носят описательный характер.



Знаковые модели - являются математическими описаниями процессов, явлений, объектов и обычно называются математическими моделями. Знаковые модели могут также включать в себя схемы и чертежи - например, схема с рециклом.

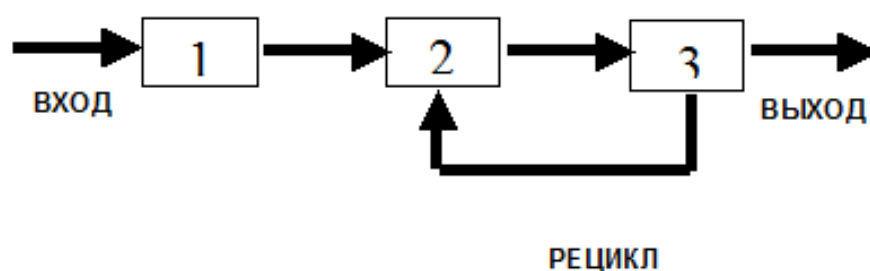


Рис. 1.2. Знаковая модель. Схема с рециклом

Материальные модели - уменьшенное (увеличенное) отражение оригинала с сохранением физической сущности (реактор - пробирка).

Как видно из приведенных схем, одни и те же модели могут быть классифицированы по разным типам признаков.

Изучение свойств объекта моделирования путем анализа аналогичных свойств его модели представляет собой процесс моделирования. В зависимости от характера и сложности тех или иных явлений при их изучении могут быть использованы соответствующие методы моделирования: геометрическое, физическое, математическое.

Создание наиболее простых моделей по принципу только геометрического подобия сходственных величин - так называемое геометрическое моделирование, используется, например, в геометрии, при составлении планов и схем.

Однако такой вид моделирования применяется в сравнительно узкой области вследствие ограниченных возможностей геометрических моделей.

В научных и инженерных исследованиях различают методы физического и математического моделирования, которые основаны на принципах физического или математического подобия. Все процессы, протекающие в физически подобных объектах, характеризуются одинаковой физической природой. Математически подобные объекты имеют различную физическую природу, но описываются уравнениями одинакового вида.

При физическом моделировании в дополнение к геометрическому подобию предусматривается подобие скоростей, сил, материальных сред и т.п.

Метод физического моделирования особенно удобен в инженерных исследованиях, так как физическая природа модели и объекта одна и та же, физическая модель полностью воспроизводит исследуемый процесс. Однако это положительное качество метода не всегда может быть использовано. В ряде случаев исследователь вынужден отказаться от воспроизводства физической картины исследуемого процесса и воспользоваться принципом математической аналогии, на котором основан метод математического моделирования.

3. Физическое моделирование

Физическое моделирование - это метод исследований на моделях, которые имеют одинаковую с оригиналом физическую природу и воспроизводят весь комплекс свойств изучаемых явлений.

Метод физического моделирования известен с XV вв., им пользовались Леонардо да Винчи, позднее Галилей и Ньютон. Во второй половине XX вв. этот метод стал применяться во многих отраслях науки и техники.

Особого внимания заслуживают работы В.Л. Кирпичева, который широко использовал физическое моделирование в артиллерийском, строительном деле и при решении различных научно-технических задач. Начиная с 1874 г., он опубликовал теоретические работы, сформулировал условия подобию упругих тел. Более 150 лет тому назад, русский инженер-строитель железнодорожных мостов Д.И. Жуковский сделал важные теоретические выводы о различных нагрузках стержней фермы моста и наглядно подтвердил их на оригинальной проволоочной модели. Примерно в то же время английские ученые-кораблестроители Фруд и Рид создали основы теории моделирования кораблей.

На базе экспериментов на моделях эта теория в дальнейшем была развита русским академиком А.Н. Крыловым.

Но физическое моделирование не сразу получило признание. Поучительным примером недооценки физического моделирования является гибель английского броненосца «Кэптен» в 1870 г. Эксперименты на модели построенного корабля показали неустойчивость конструкции, и исследователем был сделан вывод, что корабль должен опрокинуться даже при небольших волнениях. Но опыты с «игрушечной моделью» не были приняты во внимание, и при выходе в море броненосец перевернулся.

Недоверие к методу физического моделирования и недооценку его отвергла сама жизнь. В ходе научно-технического развития учение о подобию обогатилось плодотворными методами исследований, которые получили названия - анализ уравнений и анализ размерностей. Появилась воз-

возможность устанавливать условия подобия и закономерности физического моделирования, пользуясь прямой и обратной теоремами подобия, а также р-теоремой, на которой базируется анализ размерностей.

Таким образом, научной основой физического моделирования стала теория подобия, которая в сравнительно короткое время развилась в обобщающую науку. Этому способствовали научная школа акад. М.В. Кирпичева, работы А.А. Гухмана, М.А. Михеева, акад. П.К. Конакова, зарубежных исследователей Нуссельта, Рейнольдса и многих других.

Теория подобия устанавливает условия подобия модели и оригинала, дает возможность обобщать единичные эксперименты в безразмерные комплексы (критерии подобия) и распространять найденные зависимости на подобные системы.

При моделировании на основе метода подобия безразмерные комплексы играют двоякую роль. Во-первых, на их основе определяют, когда модель подобна оригиналу, при этом комплексы служат собственно критериями подобия. Во-вторых, значения тех же комплексов в сходственных точках и есть та количественная мера, которая и переносится с модели на объект. Рассмотрим некоторые часто используемые критерии подобия:

Критерий Рейнольдса (критерий гидродинамического подобия)

$$Re = w \frac{l}{\nu}, \quad (1.1)$$

где w - скорость потока;

l - определяющий размер;

ν - кинематическая вязкость.

Критерий Нуссельта (критерий теплового подобия)

$$Nu = \alpha \frac{l}{\lambda}, \quad (1.2)$$

где α - коэффициент теплоотдачи;

λ - коэффициент теплопроводности;

l - определяющий размер.

Критерии подобия позволяют установить аналогию между разными явлениями.

Но когда число критериев, определяющих подобие, достаточно велико, построение подобной модели становится нереальной задачей. Именно этим определяются трудности, возникающие при попытках применения метода подобия для моделирования химических процессов и реакторов.

Метод физического моделирования позволяет получить необходимый опытный материал, объяснить механизм изучаемых явлений, создает предпосылки для подтверждения гипотез и выработки теоретических положений.

ний. Кроме того, к преимуществам метода физического моделирования следует отнести полное воспроизводство процесса, наглядность, возможность регистрации наблюдений без преобразующих устройств (они вносят дополнительные погрешности и искажения) и изучения явлений, не поддающихся математическому описанию.

Наряду с достоинствами, метод физического моделирования имеет и существенные недостатки:

- при исследовании каждого нового процесса необходимо создавать новую модель;
- изменение параметров моделируемого объекта обычно вызывает трудоемкие переделки модели или ее замену;
- высокая стоимость моделей сложных объектов;
- в ряде случаев метод имеет ограничения или совсем неприменим.

В частности, использование метода физического моделирования затруднительно для систем, в которых протекают химические реакции.

4. Особенности химических систем

Известно, что законы элементарных актов собственно химических превращений не зависят от масштаба эксперимента. Однако наблюдения показывают, что в действительности химические процессы в значительной степени зависят от размеров реакторов. Отмеченное противоречие возникает потому, что химическая реакция приводит к изменению состава реагирующей смеси и температуры. Вследствие этого возникают процессы переноса вещества и тепла, на скорость которых существенно влияет характер концентрационного и температурного полей в реакторе, а указанные поля зависят от формы и размеров реакционной системы. В свою очередь, состав и температура существенно изменяют скорость химического превращения. В результате протекание химического процесса в целом находится в сложной зависимости от размеров аппарата.

При изменении размеров реактора могут значительно измениться как общая скорость превращения реагирующего вещества, так и соотношение скоростей образования различных продуктов, т.е. избирательность процесса. В реакционных аппаратах устанавливается специфическое для данного масштаба распределение концентраций и температур, вследствие чего наблюдаемые результаты по скорости и избирательности химических процессов в значительной мере зависят от размеров реактора. Поскольку использование метода физического моделирования обычно приводит к изменению размеров моделируемого объекта, то при построении физической модели реактора у модели могут появиться либо свойства, которые не присущи оригиналу (реактору), либо некоторые свойства объекта в его физической модели могут оказаться настолько ослабленными, что их проявле-

ние в модели практически нельзя зарегистрировать. Следовательно, создать физическую модель, подобную реактору, весьма затруднительно. Отсутствие подобия здесь объясняется тем, что сохранить одинаковое влияние физических факторов на скорость химического превращения в реакторах разного масштаба невозможно.

Тем не менее, исследователи неоднократно пытались найти критерии подобия, характеризующие химическое превращение (работы Дамкеллера, Босфорта, Дьяконова). Но все попытки оказались безрезультатными. Однако, анализ критериев Дамкеллера и сопоставление их с другими критериями подобия позволили выяснить одну из причин неприменимости метода физического моделирования для расчета реакторов.

Рассмотрим систему, в которой протекает химическая реакция. Систему можно охарактеризовать критериями подобия. Например, критерий Рейнольдса $Re = w l / \nu$ характеризует гидродинамический режим, критерий Дамкеллера $Da = w_r l / w C$, характеризует химическое превращение, и др. В приведенных критериях w и ν - скорость движения и коэффициент кинематической вязкости реакционной среды, C - концентрация реагирующего вещества, w_r - скорость реакции и l - определяющий линейный размер.

Критерии Re , Da (для упрощения другие критерии не рассматриваем) должны входить в обобщенную критериальную зависимость, характеризующую изучаемую систему. Но эти критерии несовместны между собой, поскольку при $Re = \text{const}$ величина w обратно пропорциональна, а при $Da = \text{const}$ - прямо пропорциональна величине l . Из приведенного сопоставления следует, что для сохранения гидродинамического подобия скорость потока w должна изменяться обратно пропорционально, а для сохранения химического подобия - прямо пропорционально линейному размеру l . Естественно, что в одном и том же процессе это невозможно.

В сложных системах изменение масштаба вызывает, как правило, изменение структуры системы и характера протекающих в ней процессов. Всем известно существование критических размеров системы, содержащей U-235 и U-239. Эти размеры определяются соотношением между числом образующихся при делении нейтронов и числом поглощаемых и уходящих наружу. С увеличением масштаба доля теряемых частиц уменьшается и меняется характер протекания процесса - вместо медленного деления наступает взрыв.

Несовместимость критериев подобия, во-первых, создает непреодолимые трудности при составлении критериальных уравнений и, во-вторых, указывает на то, что для химических реакторов, строго говоря, полного подобия создать нельзя. Это ограничивает применение метода физического моделирования в исследованиях процессов химической технологии, но отнюдь не исключает его. Физическое моделирование может успешно применяться в ряде технологических исследований и расчетов, например для гидравлических или тепловых систем с однофазным потоком.

Возможность применения физического моделирования

Возможность применения физического моделирования можно установить из анализа взаимосвязи $f = d - k$, где f - число независимых параметров модели (степеней свободы); d - число параметров, характеризующих процесс; k - число критериев подобия. Если независимые параметры отсутствуют ($0 > f$), то нет свободы выбора параметров модели, и исходный аппарат не имеет себе подобного. В таком случае физическое моделирование неосуществимо. Число критериев подобия, характеризующих процесс в реакторе, велико и, как правило, превышает число параметров моделируемого процесса.

В общем случае, из-за изменения соотношения отдельных стадий процесса в реакторе масштабный переход на основе физического подобия и физического моделирования осуществить нельзя. Поэтому масштабный переход к укрупненным, опытным и полупромышленным установкам можно осуществлять эмпирическим методом постепенного увеличения размеров реакторов. Однако при таком подходе из-за невозможности научного предвидения результатов протекания процесса число переходных стадий оказывается значительным, что приводит к большим затратам времени и средств и не позволяет достигнуть оптимальных результатов.

Учитывая изложенное выше, предлагалось все технoхимические расчеты разделить на две категории. *К первой категории* рекомендуется относить расчеты, связанные с физическими и (или) физико-химическими явлениями. Это процессы переноса тепла и массы вещества, которые протекают без изменения химического состава рабочей среды, а именно: теплообмен в нагревателях, холодильниках и других системах, характеризующихся небольшим числом критериев подобия. Расчеты таких процессов можно проводить на основе выводов теории подобия, позволяющих результаты экспериментальных данных, полученных на физических моделях, практически безошибочно переносить на аппараты заводских масштабов.

Ко второй категории технoхимических расчетов рекомендуется относить расчеты, связанные с химическими процессами, протекающими в реакционных аппаратах. При этом в реакторах одновременно с химическими протекают и физические процессы (тепло- и массообмен, диффузия и т.п.), которые зависят от размеров аппаратов, их типа и других факторов, а результаты исследований определяются масштабом реактора. В таких системах использование метода физического моделирования наталкивается на трудности принципиального характера вследствие того, что системы уравнений, описывающие сложные процессы, дают большое число критериев подобия, которые становятся одновременно несовместимыми. Поэтому в сложных случаях трудности физического моделирования удастся преодолеть применением метода математического моделирования.

5. Математическое моделирование

Математической моделью называется приближенное описание какого-либо явления или процесса внешнего мира, выраженное с помощью математической символики. Его целью является определение оптимальных условий протекания процесса, управление им на основе математической модели и перенос результатов на объект.

Математическое моделирование является методом научного познания, который основан на познании изучаемых процессов с помощью математической модели. Этот метод базируется на *математическом подобии*. У математически подобных объектов процессы обладают различной физической природой, но описываются идентичными уравнениями. Отказ от одинаковой природы модели и оригинала при сохранении сходства математического описания расширяет диапазон применения метода, позволяет сделать качественный скачок в развитии моделирования.

Возможность установления подобия между разнородными по физической природе явлениями не случайна. В природе имеются общие количественные соотношения. Это позволяет обобщать процесс, отвлекаясь от деталей, содержащихся в полном комплексе качеств вещей, от происходящих процессов, и изображать те или иные их стороны математически в виде функциональных связей, дифференциальных уравнений.

Рассмотрим несколько различных по физической природе явлений и их математические описания:

- перенос тепла (тепловой поток)

$$g = -\lambda \frac{dT}{dX} \text{ (закон Фурье);} \quad (1.3)$$

- перенос вещества (поток вещества)

$$j = -D \frac{dC}{dx} \text{ (закон Фика);} \quad (1.4)$$

- перенос количества движения (внутреннее трение)

$$f_{mp} = -\mu \frac{dw}{dx} \text{ (закон Ньютона);} \quad (1.5)$$

- перенос электричества

$$i = -\frac{1}{\rho} \frac{dU}{dx} \text{ (закон Ома).} \quad (1.6)$$

Знак «-» при коэффициентах уравнений означает, что поток направлен из областей с большими значениями параметра в область, где этот параметр имеет меньшее значение.

Все приведенные дифференциальные уравнения имеют идентичную математическую запись. В них входят соответствующие градиенты температуры dT/dx , концентрации dC/dx , скорости dw/dx и напряжения dU/dx .

Любой из указанных законов можно, с использованием определенных пересчетных коэффициентов, интерпретировать, например, на электрической модели, иллюстрирующей закон Ома. Электрическая модель является самой простой и может быть применена для нескольких оригиналов с различной физической природой, т.е. она становится универсальной. На такой модели воспроизводится не сам физический процесс, а его математическое описание или аналогия между законами, которые выражают явление в оригинале и в модели.

В данном случае математика выступает, по существу, в роли универсального языка науки. Его универсальность французский математик Анри Пуанкаре (1854 – 1912 г.г.) определил всего одной фразой: «Математика – это искусство называть разные вещи одним и тем же именем».

Практика научных исследований подтвердила, что вполне правомочно представлять изучаемый процесс на модели, в которой протекает другой по своей природе процесс, если математические описания этих процессов изоморфны.

Гомоморфизм - это соответствие некоторых свойств оригинала свойствам модели.

Изоморфизм - взаимный гомоморфизм, т.е. когда все свойства модели соответствуют свойствам оригинала.

Модель называется изоморфной, если между нею и реальной системой существует полное поэлементное соответствие, и гомоморфной, если существует соответствие лишь между наиболее значительными составными частями объекта и модели.

На первых порах своего развития математическое моделирование называлось аналоговым, так как принцип аналогии лежит в его основе. Аналогией в логическом смысле называют суждение о каком-либо частичном сходстве двух объектов. Это суждение позволяет на основании сходства рассматриваемых объектов в каком-либо отношении сделать вывод об их сходстве в других отношениях.

Пользуясь понятиями аналогии и изоморфизма, некоторые авторы определяют *математическое моделирование* как метод исследований, который использует принцип аналогии и основан на изоморфизме дифференциальных уравнений (или других математических выражений), описывающих различные по своей природе явления в оригинале и в модели. Использование метода аналогии привело к появлению аналоговых вычислительных машин - АВМ. Это электронные устройства, состоящие из интеграторов, дифференцирующих устройств, сумматоров и усилителей. На АВМ моделировались физические явления, которые аналогичны эффектам электрической природы.

Идея математического моделирования состоит в замене реального объекта его «образом» – математической моделью – и в дальнейшем изучении модели в целях получения новых знаний об этом объекте. При этом у исследователя появляется возможность экспериментировать с моделью объекта даже в тех случаях, когда делать это на реальном объекте практически невозможно или нецелесообразно. Работа не с самим объектом (явлением, процессом), а с его математической моделью дает возможность относительно быстро и без существенных затрат исследовать его свойства и поведение в любых мыслимых ситуациях (преимущества теории). В то же время вычислительные (имитационные) эксперименты с моделями объектов позволяют подробно и глубоко изучать объекты в достаточной полноте, недоступной чисто теоретическим подходам (преимущества эксперимента).

Математическое моделирование:

- позволяет осуществить с помощью одного устройства решение целого класса задач, имеющих одинаковое математическое описание;
- обеспечивает простоту перехода от одной задачи к другой, введение переменных параметров, возмущений и различных начальных условий;
- дает возможность моделировать по частям (по «элементарным» процессам), что особенно существенно при исследованиях сложных объектов химической технологии;
- использует весьма эффективное средство исследования процессов – быстродействующую вычислительную технику, которая непрерывно совершенствуется;
- экономичнее метода физического моделирования как по затратам времени, так и по стоимости.

В практике исследований процессов химической технологии с помощью математического моделирования сравнительно просто удастся изменять параметры исследуемого объекта и выяснять их влияние на качество его работы в целом. Это возможно потому, что деформация модели процесса изучается не на физической модели, а непосредственно на математической модели при использовании ЭВМ.

Существенным недостатком математического моделирования является сложность математического описания. Принимаемые допущения нередко искажают сущность процесса, что значительно снижает точность решения задач, несмотря на возможность современной вычислительной техники обеспечить высокую точность решения. Кроме того, при математическом моделировании не удастся визуально наблюдать за ходом процесса.

Теория эксперимента дает исследователю точную логическую схему и способ решения задач на разных этапах исследования. Исследование состоит из следующих составных этапов: формализация априорных сведений об исследуемом технологическом объекте, выдвижении гипотезы о мате-

математической структуре объекта, планировании экспериментов, оценивании и проверке гипотез о параметрах модели, проверка гипотез об адекватности модели и условиях окончания построения модели.

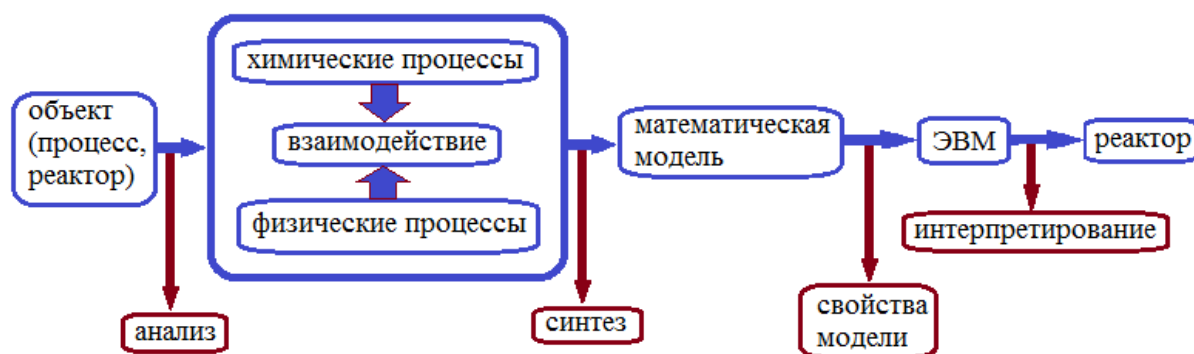


Рис. 1.3. Схема математического моделирования химического процесса

Методология математического моделирования предусматривает тщательную отработку моделей. Обычно, начав с очень простой модели, постепенно продвигаются к более совершенной ее форме, отражающей сложную природу изучаемого объекта более точно.

Искусство моделирования состоит в способности анализировать проблему, выделять из нее путем абстракции наиболее существенные черты, выбирать и должным образом модифицировать предположения, характеризующие объект (систему), а затем отрабатывать и совершенствовать модель до тех пор, пока она не станет давать полезные для практики результаты. Таким образом, разработка и применение компьютерных моделей все еще в большей степени искусство, нежели наука. Следовательно, как и в других видах искусства, успех или неудача определяется не столько методом, сколько тем, как он применяется.

При построении математической модели реальное явление упрощается, схематизируется, и полученная схема описывается в зависимости от сложности явлений с помощью того или иного математического аппарата.

Метод математического моделирования применяют при изучении процессов, для которых имеется достаточно точное математическое описание. В зависимости от степени полноты математического описания можно выделить два предельных случая:

а) известны полная система уравнений, описывающая все основные стороны моделируемого процесса и все числовые значения параметров этих уравнений;

б) полное математическое описание процесса отсутствует.

Второй случай типичен для решения кибернетических задач, в которых приходится иметь дело с управлением процессами при наличии неполной информации об объекте и действующих на него возмущениях. При отсутствии достаточной информации об исследуемых явлениях их изуче-

ние начинается с построения простейших моделей, но без нарушения основной (качественной) специфики исследуемого процесса.

Существует два подхода к составлению математического описания.

1. Когда весь химико-технологический процесс рассматривается как единая структурная единица с протекающими в ней процессами тепло- и массообмена, физическими и химическими процессами и т.д.

2. Расчленение сложного объекта на технологические звенья, в которых протекают сходные между собой процессы химической технологии.

Установление признаков схожести процессов осложняется тем, что химическая технология характеризуется многообразием процессов, которые можно классифицировать с разных позиций. Поэтому в целях выделения типовых процессов химической технологии и определения их природы используют несколько основных критериев.

Основные критерии классификации химико-технологических процессов

1. Общность математического описания (модели) процессов. Это по существу идентичность материальных и энергетических связей. Такая общность модели учитывает физико-химические особенности процессов.

2. Общность аппаратурно-технологического оформления процессов, отражающая их целевое назначение и условия реализации.

3. Общность особенностей автоматического управления, которая связана с природой процессов. По этому признаку, как уже указывалось, процессы могут быть или детерминированными или стохастическими.

Кроме того, по характеру материальных и энергетических связей все многообразие процессов химической технологии можно разделить на 5 основных классов:

- гидродинамические;
- тепловые;
- диффузионные или массообменные;
- механические;
- химические.

К классу гидродинамических относятся процессы перемещения жидкостей и газов по трубопроводам и аппаратам, перемешивание в жидких средах, процессы обработки неоднородных жидких и газовых систем (очистка газов от пыли и туманов, разделение суспензий и эмульсий путем отстаивания, фильтрования, центрифугирования и т.п.). Скорость гидродинамических процессов определяется законами механики и гидродинамики.

Класс тепловых процессов составляют процессы нагревания, охлаждения, конденсации, выпаривания, теплообмена и т.п. Скорость тепловых процессов определяется законами теплопередачи.

Класс диффузионных (массообменных) процессов связан с переносом вещества в различных агрегатных состояниях из одной фазы в другую (абсорбция, дистилляция и ректификация, адсорбция, десорбция, растворения, кристаллизация, увлажнение, сушка, сублимация, ионный обмен и др.). Скорость диффузионных процессов определяется законами массопереноса.

К классу механических процессов относятся процессы дробления, измельчения, грохочения, транспортирования твердых материалов, гранулирования и др.

Класс химических процессов характеризуется большим многообразием. Скорость химических процессов определяется законами химической кинетики. Хотя эти процессы являются наиболее важными, научная классификация их продолжает оставаться одной из нерешенных задач химической технологии как науки. Попытки разделения химических процессов на органические и неорганические, по отраслевому, а также по некоторым другим признакам, оказались неудачными, так как при этом не обеспечивалась строгость и полнота классификации.

Пример использования моделирования для уточнения сценария образования полихромной керамики на ЧАЭС
(по материалам статьи Пазухина Э.М., Лагуненко А.С., Краснова В.А., Билько В.В. Топливо на верхних отметках разрушенного 4-го блока ЧАЭС. Уточнение сценария образования полихромной керамики)

1. Исходные данные для моделирования и физическая модель процесса.

Для моделирования процесса образования лавы была выбрана область южной части помещения 804/4, выходящая в шахту реактора при условии засыпки поврежденных технологических каналов с топливными кассетами серпентинитом и образования ЛТСМ с содержанием UO_2 9 %.

При формулировке физической модели процесса были приняты следующие *допущения*:

- при аварии РБМК-1000 некоторое количество фрагментов технологических циркониевых каналов (с топливной кассетой внутри, стенки каналов повреждены) попадает в объем из серпентинита намного превышающий объем сборок (рис. 1.4);
- нижнее и верхнее основания объема серпентинита контактирует с воздухом окружающей среды;
- сборка (из 18-и ТВЭЛов с циркониевой оболочкой) представляется в виде одного цилиндра;
- стенки технологического канала повреждены настолько, что серпентинит имеет сразу непосредственный доступ к ТВЭлам;
- объемы зон, до завершения процесса лавообразования неизменны.

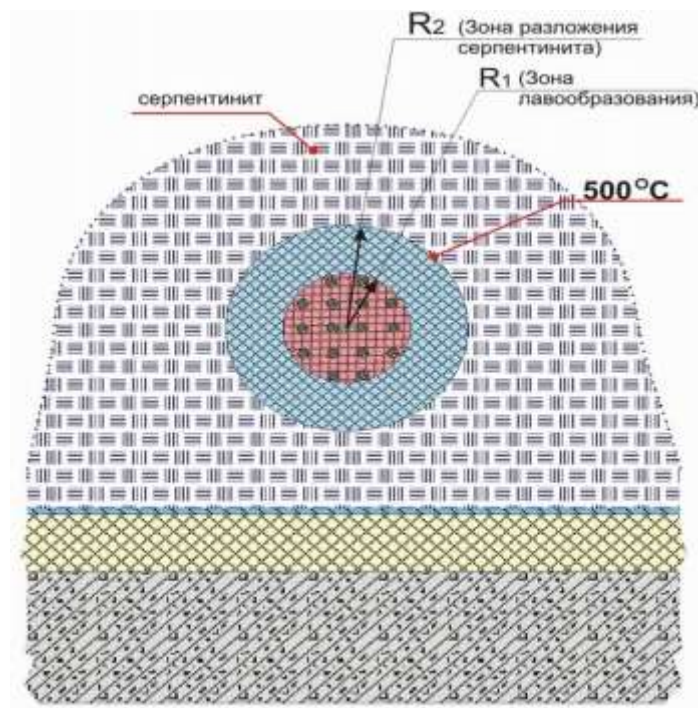
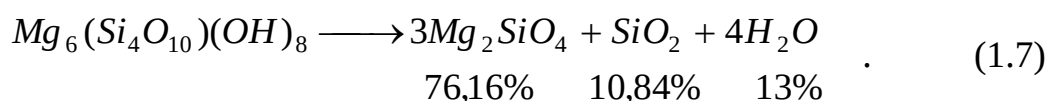


Рис. 1.4. Графическое представление модели. Поперечное сечение

Серпентинит под воздействием температуры $>500\text{ }^{\circ}\text{C}$ разлагается на оливин-форстерит и диоксид кремния.



Зададим следующую последовательность стадий образования лавы.

1. Циркониевая оболочка твэлов изнутри плавится и при этом растворяет в себе топливные таблетки с образованием жидкой уран-циркониевой эвтектики.

2. Уран-циркониевая эвтектика, вступает во взаимодействие с диоксидом кремния (основная составляющая лав). Образуется тройная система $\text{UO}_2\text{-SiO}_2\text{-ZrO}_2$.

3. Дальнейший процесс лавообразования происходит при $1500\ldots 1700\text{ }^{\circ}\text{C}$.

В результате анализа мощности тепловыделения топлива 4-го блока ЧАЭС после его разрушения для интервала 0 - 240 ч удельное тепловыделение удовлетворительно аппроксимировано уравнением

$$(Q \cdot 10^{-6}) = -9.07 \cdot 10^{-5} \cdot \tau^2 + 7.48 \cdot 10^{-2} \cdot \tau + 5.03 \cdot 10^{-1}, \text{ ккал} \quad (1.8)$$

Физические процессы, происходящие после аварии:

- нагрев системы, состоящей из кассет, происходит за счет выделения остаточной теплоты в оксиде урана;
- сток тепла (поглощение) может осуществляться за счет:

- а) плавления циркония;
- б) разложения серпентинита и плавления продуктов его разложения;
- в) теплообмена с окружающей средой;
- г) плавления пластины нержавеющей стали.

Таким образом, в объеме, который занимает серпентинит, рассматривается два фазовых перехода (разложение и плавление), а в циркониевой оболочке и стальной пластине только фазовый переход 1-го рода. Предполагается, что указанные фазовые переходы происходят на некотором интервале температур. При фазовых переходах происходит скачок теплофизических свойств и выделяется соответствующая теплота фазового перехода. Принятые допущения позволяют сформулировать данную задачу в обобщенной постановке.

Математическая модель процесса.

Температурное поле в системе, состоящей из кассет, объема серпентинита и «нижнего основания» можно описать нестационарным уравнением теплопроводности с внутренними источниками тепла

$$c_{pi}(t)\rho_i(t)\frac{\partial t}{\partial \tau} = \text{div}[\lambda_i(t)\nabla t(X)] + q_{vi}(X), \tau > 0, \quad (1.9)$$

где $c_{pi}(t), \rho_i(t), \lambda_i(t)$ - температурные зависимости удельной изобарной теплоемкости, плотности и теплопроводности i -го элемента системы, Дж/(кг·К), кг/м³, Вт/(м·К); t - температура, °С; $X(x, y) \in \Omega \in R^3$ - декартовы координаты, м; q_{vi} - внутренний источник тепла в i -м элементе системы, Вт/м³; $i = \overline{1, n}$ - номер области, n - количество областей.

Математическая формулировка со сглаживанием теплофизических свойств с учетом теплоты фазовых превращений может быть представлена в виде

$$\left\{ \begin{array}{l} t < t_{\text{mik}} - \frac{\Delta t}{2}, \quad \lambda_i(t) = \lambda_{ik-0}(t); [c_p(t)\rho(t)]_i = c_{pik-0}(t)\rho(t)_{ik-0}; \\ t_{\text{mik}} - \frac{\Delta t}{2} \leq t \leq t_{\text{mik}} + \frac{\Delta t}{2}, \\ \lambda_{ik}(t) = \lambda_{ik}(t_{\text{mik}} - \Delta t/2) + \frac{[\lambda_{ik}(t_{\text{mik}} - \Delta t/2) - \lambda_{ik}(t_{\text{mik}} + \Delta t/2)]}{\Delta t} \cdot (t - t_{\text{mik}} + \Delta t/2); \\ [c_p(t)\rho(t)]_i = c_{pik}(t)\rho_{ik}(t) + [c_{pik}(t_{\text{mik}} - \Delta t/2)\rho_{ik}(t_{\text{mik}} - \Delta t/2) - \\ - c_{pik}(t_{\text{mik}} + \Delta t/2)\rho_{ik}(t_{\text{mik}} + \Delta t/2)]/\Delta t \cdot (t - t_{\text{mik}} + \Delta t/2) + L_{ik}/\Delta t; \\ t > t_{\text{mik}} + \frac{\Delta t}{2}, \quad \lambda_i(t) = \lambda_{ik+0}(t); [c_p(t)\rho(t)]_i = c_{pik+0}(t)\rho(t)_{ik+0}. \end{array} \right. \quad (1.10)$$

где индекс m - относится к фазовому переходу; индекс $i = \overline{1, n}$ - относится

к номеру области, а индекс $k = \overline{1,3}$ – относится к номеру фазового перехода в области i ; Δt – интервал сглаживания при фазовом переходе; индексы -0 и $+0$ означают, что свойства берутся слева и справа от температуры фазового перехода; L_{ik} – теплота фазового перехода 1-го рода (например, теплота плавления или затвердевания).

Начальные условия:

$$t|_i^{\tau=0} = t_{\Gamma i}(X). \quad (1.11)$$

Граничные условия $\tau > 0$:

- на границе системы с окружающей средой (бетон – воздух и серпентинит – воздух)

$$-\lambda_i(t) \frac{\partial t}{\partial n} \Big|_{\Gamma} = \alpha(t - t_{\Gamma i}(X)); \quad (1.12)$$

- на боковых поверхностях системы – адиабатные условия

$$\frac{\partial t}{\partial n} = 0. \quad (1.13)$$

Поскольку рассмотренная задача является нелинейной, то для более эффективного ее решения пользуются энтальпийной формулировкой (1.9) (т.е. применяют так называемое энтальпийное сглаживание)

$$\frac{\partial H_i}{\partial \tau} = \text{div}[\lambda_i(t) \nabla t(X)] + q_{vi}(X), \tau > 0, \quad (1.14)$$

где

$$\begin{aligned} H_i = & \int_0^{t_{mik} - \Delta t / 2} c_{pik-0}(t) \rho_{ik-0}(t) dt + \\ & + \frac{\left[c_{pik-0} \left(t_{mik} - \frac{\Delta t}{2} \right) \rho_{ik-0} \left(t_{mik} - \frac{\Delta t}{2} \right) + c_{pik+0} \left(t_{mik} + \frac{\Delta t}{2} \right) \rho_{ik+0} \left(t_{mik} + \frac{\Delta t}{2} \right) \right] \Delta t}{2} + L_{ik} + \\ & + \int_{t_{mik} + \Delta t / 2}^{t > t_{mik} + \Delta t / 2} c_{pik+0}(t) \rho_{ik+0}(t) dt \end{aligned}$$

- энтальпия, которая с увеличением температуры является монотонно возрастающей функцией. В энтальпию также входит теплота фазового перехода.

Тестирование предложенной численной модели было выполнено на известных аналитических решениях (нестационарная теплопроводность бесконечного цилиндра при граничных условиях 3-рода - решение Фурье,

стационарная теплопроводность бесконечного цилиндра с внутренними источниками тепла при краевых условиях 3-го рода).

В результате тестирования получено, что погрешность расчета температурного поля (δt %) с использованием численной модели составляет:

- $\delta t = 0,15...0,87$ % - при решении задачи нестационарной теплопроводности и зависит от шага интегрирования по времени;

- $\delta t = 0,0006$ % - при решении задачи стационарной теплопроводности с внутренними источниками тепла.

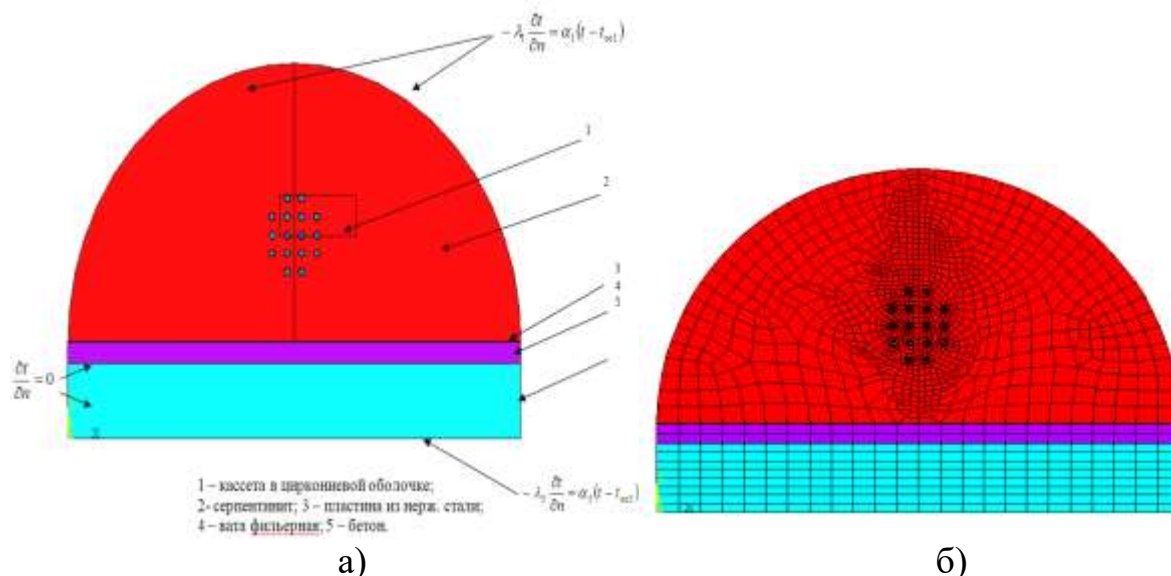


Рис. 1.5. а) - геометрические характеристики численной модели (16 кассет);
б) - расчетная сетка численной модели процесса лавообразования (16 кассет);
 $\alpha_1 = 5 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$; $t_{oc1} = 20$ °С; $\alpha_5 = 7 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$; $t_{oc5} = 40$ °С

На основе полученных данных по химическому составу полихромных ЛТСМ проведено математическое моделирование процесса лавообразования на верхних отметках разрушенного 4-го блока Чернобыльской АЭС. Определено количество участков (два) и их координаты.

Выполненные расчеты показывают, что для осуществления процесса лавообразования в условиях протекания активной стадии чернобыльской аварии было необходимо около 2 т ОЯТ (16 кассет).

Консервативная оценка, полученная при анализе расчетов, дает основание утверждать, что в настоящий момент на верхних отметках разрушенного 4-го блока находится не менее 15 т ЛТСМ (1 т UO_2). Этот факт необходимо обязательно учитывать при разработке стратегии извлечения ОЯТ из ЦЗ, а также при сооружении НБК и преобразовании объекта «Укрытие» в экологически-безопасную систему. Произведена оценка конечной максимальной температуры в зоне лавообразования - около 1900 К (количество кассет в системе 16), что хорошо согласуется со сценарием образования ЛТСМ, который был предложен ранее в МНТЦ «Укрытие» НАН Украины. Итак, впервые моделирование было использовано в аэро- и гидро-

механике. С этой целью была развита теория подобия, основанная на физическом моделировании, в котором природа процесса и модели одинаковая. В химической технологии физическое моделирование широко используют для изучения тепловых и диффузионных процессов. В химическом реакторе протекают химические реакции, и происходит перенос тепла и вещества. Их взаимное влияние и результаты процесса зависят от размера и типа реактора. Поэтому для изучения химических процессов и реакторов теорию подобия применяют весьма ограниченно.

Для изучения этих процессов используют преимущественно математическое моделирование, поскольку оно позволяет тождественными уравнениями описывать свойства процессов различной природы. Математическая модель может быть знаковой, представленной уравнениями и реальной, представленной физическим объектом, как правило, ЭВМ. В дальнейшем под моделью подразумевается знаковая или реальная математическая модель, адекватно отражающая физико-химические превращения и явления переноса тепла и вещества в изучаемом процессе.

Метод математического моделирования позволяет:

- исключить необходимость изготовления громоздких физических моделей, связанную с материальными затратами;
- сокращать время определения характеристик (в особенности при расчете математических моделей на ЭВМ и применении эффективных вычислительных методов и алгоритмов);
- изучать поведение объекта моделирования при различных значениях параметров;
- анализировать применимость различных элементов;
- получать характеристики и показатели, которые сложно снимать экспериментально (корреляционные, частотные, параметрической чувствительности).

Для решения задач, связанных с изучением и разработкой реакторов, процесс можно представить несколькими моделями, с помощью которых можно не только воспроизвести известные свойства процесса, но и предсказать ранее неизвестные.

Вопросы самоконтроля

1. Основные требования к модели.
2. Какие объекты называются подобными?
3. По каким типам признаков можно классифицировать модели?
4. Что понимается под моделью (знаковой или реальной) применительно к химической технологии?
5. Что представляет собой процесс моделирования?
6. Что представляет собой геометрическое моделирование?

7. Что лежит в основе физического моделирования?
8. Что является научной основой физического моделирования и почему?
9. Достоинства и недостатки метода физического моделирования.
10. Ограничения по применению физических моделей для химических процессов.
11. Почему затруднительно создать физическую модель для систем, в которых протекают химические реакции?
12. Как можно установить возможность применения физического моделирования?
13. Несовместимость гидродинамических и кинетических критериев подобия. Пример.
14. Что лежит в основе математического моделирования?
15. Чем характеризуются математически подобные объекты?
16. Что представляет собой математическое моделирование?
17. Изоморфизм и гомоморфизм модели.
18. Достоинства и недостатки математического моделирования.
19. Схема математического моделирования химического процесса.
20. Основные критерии классификации химико-технологических процессов.

Литература

1. Бельков В.П. Математические модели химико-технологических процессов / В.П. Бельков, В.В. Шестопапов, В.В. Кафаров. – Ч.2. – М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева, 1981. – 40 с.
2. Бесков В.С. Моделирование каталитических процессов и реакторов / В.С. Бесков, В. Флокк. – М.: Химия, 1991. – 256 с.
3. Бондарь А.Г. Математическое моделирование в химической технологии / А.Г. Бондарь. – К.: Высшая школа, 1973. – 280 с.
4. Гартман Т.Н. Решение типовых задач по моделированию и оптимизации / Т.Н. Гартман, А.И. Новиков, Н.Н. Цуканова, Ю.К. Щипин / Под ред. А.И. Боянрова. - М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева, 1980. – 80 с.
5. Гордеев Л.С. Математическое моделирование химико-технологических систем / Л.С. Гордеев, Е.С. Кадосова, В.В. Марков, Ю.В. Сбоева. – Ч.1. – Методологические и теоретические основы: Текст лекций. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 1999. – 48 с.
6. Дворецкий Д.С. Компьютерное моделирование биотехнологических процессов и систем / Д.С. Дворецкий, С.И. Дворецкий, Е.И. Муратова, А.А. Ермаков. - Тамбов: ТГТУ, 2005. – 80 с.
7. Закгейм А.Ю. Введение в моделирование химико-технологических процессов / А.Ю. Закгейм. - М.: Химии, 1982. – 288 с.

8. *Кафаров В.В.* Математическое моделирование основных процессов химических производств / В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. – М.: Высшая школа, 1991. – 386 с.

9. *Пазухин Э.М.* Топливо на верхних отметках разрушенного 4-го блока ЧАЭС. Уточнение сценария образования полихромной керамики / Э.М. Пазухин, А.С. Лагуненко, В.А. Краснов, В.В. Билько // Журнал «Радиохимия» на сайте НПО «Радиевый институт им. В.Г. Хлопина». – 2006. – Т.48, //Вып. 5. – С. 470; <http://www.khlopin.ru/radchem/2006-5.pdf>.

10. *Луговской В.И.* Конспект лекций по курсу «Математическое моделирование химико-технологических процессов»: Электронный конспект лекций / В.И. Луговской, К.С. Синявский, Р.В. Дубс. – Одесса: Политехнический университет, 2002.

11. *Федорова С.А.* Основные этапы составления математических моделей / С.А. Федорова. – Севастополь: СИЯЭиП, 2000. – 28 с.

12. *Федорова С.А.* Методические указания по математическому моделированию и применению ЭВМ в химической технологии для студентов заочной формы обучения / С.А. Федорова. - Севастополь: СНИЯЭиП, 2003. – 68 с.

13. *Чермак И.* Динамика регулируемых систем в теплоэнергетике и химии / И. Чермак, В. Петерка, И. Заборка. – М.: Мир, 1972. – 623 с.

Л е к ц и я № 2

ОСНОВНЫЕ ЭТАПЫ СОСТАВЛЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ОБЪЕКТОВ ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

Математическая модель является системой уравнений математического описания, отражающей сущность протекающих в объекте явлений, для которой определен алгоритм решения, реализованный в форме моделирующей программы. Согласно этому определению математическая модель должна рассматриваться в совокупности трех ее аспектов: смыслового, аналитического и вычислительного.

Смысловой аспект представляет собой физическое описание природы моделируемого объекта.

Аналитический аспект является математическим описанием процесса в виде некоторой системы уравнений, отражающей протекающие в объекте явления и функциональные связи между ними.

Вычислительный аспект есть метод и алгоритм решения системы уравнений математического описания, реализованные как моделирующая программа на одном из языков программирования.

Описание любого объекта начинается с изучения его свойств. Изучают природу объекта, физико-химические процессы, протекающие в нем, факторы, влияющие на объект. В соответствии с этими процессами составляют математическое описание изучаемого объекта (процесса).

Составление математических моделей объектов химической технологии осуществляется по этапам, количество которых определяется сложностью изучаемого объекта, наличием сведений о связях между его параметрами и другой информацией. Однако, независимо от содержания, количества и последовательности возможных этапов, в ходе математического моделирования объектов химической технологии всегда приходится решать три основные задачи: составление математической модели, нахождение ее решения и проверка адекватности модели изучаемому процессу.

1. Физическое описание природы объекта

Построение математической модели начинают с физического описания объекта моделирования.

Объектом исследования методом математического моделирования в химической технологии являются процессы химической технологии.

Процессы химической технологии - это сложные физико-химические системы, имеющие двойственную детерминированно-стохастическую природу, переменные в пространстве и во времени. Участ-

вующие в ней потоки вещества, как правило, многофазные и многокомпонентные. В ходе протекания процесса в каждой точке фазы и на границах раздела происходит перенос импульса, энергии, массы. Весь процесс в целом протекает в аппарате с конкретными геометрическими характеристиками, оказывающими, в свою очередь, влияние на характер этого процесса.

При составлении математической модели выделяют «элементарные» процессы, протекающие в объекте моделирования, которые подлежат отражению в модели, и формулируют основные допущения, принимаемые при их описании. Перечень учитываемых «элементарных» процессов определяет совокупность явлений, описывающих объект, которые включают в математическую модель. Под «элементарным» процессом понимается физико-химический процесс, относящийся к определенному классу явлений - массообмен, теплопередача и т.д.

Так, например, при рассмотрении явлений, возникающих в процессе движения ансамбля частиц, капли или пузырьков газа в сплошной жидкой среде, выделяют пять уровней иерархии эффектов:

- 1) совокупность явлений на атомарно-молекулярном уровне;
- 2) эффекты в масштабе надмолекулярных или глобулярных структур;
- 3) множество физико-химических явлений, связанных с движением единичного включения дисперсной фазы, с учетом химических реакций и явлений межфазного энерго- и массопереноса;
- 4) физико-химические процессы в ансамбле включений, перемещающихся в сплошной фазе;
- 5) совокупность процессов, определяющих макрогидродинамическую обстановку в масштабе аппарата.

Уравнения, в составе математической модели на основе физического описания, можно сгруппировать по ряду признаков (рис. 2.1).



Рис. 2.1. Логическая схема построения математической модели химико-технологического процесса на основе физического описания объекта

При построении математической модели реальное явление упрощается, схематизируется, и полученная схема описывается в зависимости от сложности явлений с помощью того или иного математического аппарата.

Такой подход позволяет наиболее полно установить совокупность явлений всего процесса и связей между ними.

В составе математического описания, разработанного на основе физической природы моделируемого объекта, выделяют следующие группы уравнений.

1. Уравнения сохранения массы и энергии, записанные с учетом гидродинамической структуры движения потоков. Данная группа уравнений характеризует распределение в потоках температуры, концентраций и связанных с ним свойств. Обобщенное **уравнение материального баланса** имеет вид

$$\text{Приход вещества} - \text{Расход вещества} = \text{Накопление вещества.} \quad (2.1)$$

Разность между приходом и расходом вещества равна изменению его количества в рассматриваемом объекте. В стационарном режиме не может происходить ни убыль, ни накопление. В этом случае уравнение (2.1) переходит в уравнение материального баланса вида

$$\text{Приход вещества} = \text{Расход вещества.} \quad (2.2)$$

Уравнения (2.1), (2.2) применяют как к каждому веществу в отдельности, так и ко всей совокупности веществ, участвующих в процессе.

Различают материальные балансы:

- а) по веществу;
- б) общий.

Обобщенное уравнение сохранения массы может также применяться к каждому химическому компоненту системы. Эти уравнения можно распространить также на атомный уровень и можно применять к химическим элементам.

Если накопление вещества равно 0, то это статический процесс. Если накопление вещества $\neq 0$, то это динамический процесс.

Рассмотрим основные составляющие уравнений материального баланса.

Накопление вещества. Изменение массы некоторого компонента в пределах системы может быть представлено в виде производной массы по времени $\frac{dm_i}{dt}$ (накопление массы компонента в системе), где масса i -го вещества m_i выражена в кг или молях, а время в часах, минутах или секундах. Для любого компонента

$$\frac{dm_i}{dt} = \frac{d(V * C_i)}{dt}, \quad (2.3)$$

где C_i - концентрация компонента i (кмоль/м³ или кг/м³).

Для газов может использоваться уравнение Менделеева - Клапейрона, которое связывает концентрацию с парциальным давлением и мольной долей

$$p_i * V = n_i * R * T, \quad (2.4)$$

где p_i - парциальное давление компонента i в пределах системы газовой фазы; n_i - число молей газа; R - константа идеального газа (*в соответствующих совместимых C, p, V, M и T единицах измерения*).

В терминах концентрации:

$$C_i = \frac{n_i M_i}{V} = \frac{p_i * M_i}{R * T} = \frac{y_i * P * M_i}{R * T}, \quad (2.5)$$

где y_i - мольная доля компонента в газовой фазе, и P - полное давление в системе.

Накопления для газовой фазы может быть написано в виде числа молей

$$\frac{dm_i}{dt} = \frac{d(V * C_i)}{dt} = \frac{d\left(\frac{p_i * V * M_i}{R * T}\right)}{dt} = \frac{d\left(\frac{y_i * P * V * M_i}{R * T}\right)}{dt}. \quad (2.6)$$

Для всей системы можно записать:

$$\frac{dm}{dt} = \frac{d(V * \rho)}{dt}. \quad (2.7)$$

Обобщенное **уравнение теплового баланса** имеет вид

$$\text{Приход теплоты} - \text{Расход теплоты} = \text{Накопление теплоты}, \quad (2.8)$$

или для стационарных условий

$$\text{Приход теплоты} = \text{Расход теплоты} \quad (2.9)$$

В условиях (2.8), (2.9) следует учесть работу, но поскольку во многих процессах энергетические эффекты являются тепловыми, при составлении уравнений сохранения энергии можно пользоваться указанными условиями.

Энергетический баланс необходим всякий раз, когда важны температурные изменения. Например, как это имеет место при химической реакции, когда реакции вызывает изменение температуры в реакторной зоне.

Для энергетического баланса необходимо придерживаться тех же принципов. Однако энергетические балансы значительно более сложны, из-за многих процессов, которые вызывают температурное изменение в химических системах.

Энергетический баланс базируется на законе сохранения энергии и на первом законе термодинамики. Внутренняя энергия зависит, не только от температуры, но также и от массы системы и ее составляющих.

По этой причине, материальный баланс является необходимым фундаментом энергетического баланса.

Для открытой системы с энергетическим обменом поперек его границ энергетический баланс может быть написан как:

$$(\text{Количество накопленной энергии}) = (\text{Количество энергии во входных потоках}) - (\text{Количество энергии в выходных потоках}) + (\text{Количество энергии, полученное через поверхность}) - (\text{Количество энергии, унесенное через поверхность}) \quad (2.10)$$

Если накопление тепловой энергии = 0, то это статический процесс. Если накопление тепловой энергии $\neq 0$, то это динамический процесс.

Количество **накопленной энергии** определяется так

$$\left(\sum_{i=1}^S (n_{i,вых} * c_{pi,вых}) \right) * \frac{dT}{dt} = V * \rho * c_p * T \quad (2.11)$$

поскольку принято

$$\sum_{i=1}^S (n_{i,вх} * c_{pi,вх}) = \sum_{i=1}^S (n_{i,вых} * c_{pi,вых}) = V * \rho * c_p, \quad (2.12)$$

где $n_{i,вх}, n_{i,вых}$ - число молей i-го вещества во входном и выходном потоке;

$c_{pi,вх}, c_{pi,вых}$ - удельная мольная теплоемкость i-го вещества во входном и выходном потоке.

Количество энергии в **конвективных потоках** определяется следующим образом:

$$F_0 * \sum_{i=1}^S C_{iвх} * \int_{T_{вых}}^{T_{вх}} c_{pi} * dT_{вых} = F_0 * \rho * c_p * (T_{вх} - T_{вых}), \quad (2.13)$$

где $C_{iвх}$ - концентрация i-го вещества во входном потоке;

$T_{вх}, T_{вых}$ - температура входного и выходного потока.

Количество энергии, унесенное через поверхность

$$K_{mn} * S * (T_a - T_1), \quad (2.14)$$

где K_{mn} - коэффициент теплопередачи;

S - площадь поверхности теплообмена.

Определение теплового эффекта химического процесса. Если теплота j-ой реакции ΔH_j , то количество теплоты, образующееся в результате химического процесса

$$Q_{реакц} = \sum_{j=1}^{n_R} \Delta H_j * r_j. \quad (2.15)$$

Например, для химического процесса



$$Q_{реакц} = (-\Delta H_1) * K_1 * C_A * C_B^2 + (-\Delta H_2) * K_2 * C_D * C_B^2 \quad (2.18)$$

Как правило, динамический процесс описывается системой дифференциальных уравнений в частных производных, а статический процесс записывается в виде системы обыкновенных дифференциальных или алгебраических уравнений.

Для описания процессов массопереноса используются законы молекулярного и конвективного переноса.

Конвективные потоки (конвективный перенос). Конвективный поток полной массы оценивают как произведение объемного расхода w и плотности ρ

$$M = w * \rho. \quad (2.19)$$

Конвективный поток для массы по компонентам

$$M_i = w * C_i \quad (2.20)$$

Диффузия компонентов (молекулярный перенос). Диффузионный поток в технических приложениях обычно выражается в соответствии с законом Фика для молекулярной диффузии

$$j_i = -D_i * \frac{dC_i}{dZ}, \quad (2.21)$$

где j_i - поперечный поток любого компонента (кмоль/м²/с);

$\frac{dC_i}{dZ}$ - градиент концентрации (кмоль/м³/м);

D_i - коэффициент диффузии компонента i (м²/с).

В соответствии с законом Фика этот поток всегда направлен в сторону уменьшения концентрации.

При истинной молекулярной диффузии, константа диффузии равна молекулярному коэффициенту диффузии D компонента i в системе.

Для других случаев, типа диффузии в пористых материалах и для турбулентных приложений диффузии, используется эффективное значение, которое должно быть определено экспериментально.

Вычисление массы диффузии требует знания площади поверхности S , через которую она происходит.

Концентрационный градиент можно приближенно записать в виде

$$j_i * S = -D_i * \frac{\Delta C_i}{\Delta Z} * S. \quad (2.22)$$

Массопередача (межфазный перенос). Массопередача также может представлять возможный ввод (вход) или сток для рассматриваемой области. Для межфазного перехода из фазы G в фазу L , который происходит поперек через площадь поверхности S , которая отделяет две фазы, полный массовый поток определяется формулой

$$J = K * S * \Delta C, \quad (2.23)$$

где J - полный массовый поток (кмоль/сек);

S - полная площадь поверхности раздела для массообмена (м^2);

ΔC - концентрационная движущая сила (кмоль/ м^3);

K - коэффициент массообмена (м/с).

Концентрационная движущая сила представляется как разность между фактической концентрацией и равновесной.

Продукционные потоки. Так называемые продукционные продукты учитывают производство или расход вещества в химической реакции и должны быть включены в уравнения математического описания. Эти потоки определяются следующим образом:

$$R_A = r_A * V, \quad (2.24)$$

где R_A - скорость химической реакции по веществу A (кг/с); r_A - количество вещества, которое образуется в единице объема V (м^3) реактора в единицу времени.

2. Теоретические, полуэмпирические или эмпирические соотношения между различными параметрами процесса.

Эти соотношения определяют важные элементы, которые определяются из эксперимента. Это могут быть стехиометрические коэффициенты веществ, участвующих в химической реакции, корреляции для коэффициентов массообмена, физические корреляции как функции концентрации, температуры и т.д. В уравнение математического описания входят параметры модели (эмпирические соотношения и эмпирические константы), которые определяются по экспериментальным данным, тем самым модель подстраивается под эксперимент. Например, зависимость коэффициента массопередачи от скоростей потоков фаз, зависимость теплоемкости смеси от состава и т.д.

Например, **константа скорости химической реакции** как функция концентрации и температуры.

Для примера приведем уравнение Аррениуса для константы скорости химической реакции

$$K = K_0 * \exp\left(-\frac{E}{R * T}\right), \quad (2.25)$$

где K_0 - предэкспоненциальный множитель;

E - энергия активации;

T - температура, К;

R - универсальная газовая постоянная.

3. Ограничения на параметры процесса. Полнота модели определяется допущениями, которые мы принимаем при составлении системы уравнений математической модели. Например, при моделировании процесса ректификации многокомпонентных смесей на любой ступени разделения должно выполняться условие, что сумма концентраций всех компонентов равна 1.

Построение математической модели объектов регулирования методами физико-математического анализа не приводит к простым задачам, особенно для конструктивно сложных систем, например барабанных и прямоточных котлов, ректификационных колонн и химических реакторов. С одной стороны, надо уметь сочетать физические и математические знания и, с другой стороны, выбирать в сложных системах те основные факторы, которые больше всего влияют на динамические характеристики систем.

Возникает вопрос, почему следует заниматься именно физико-математическим анализом, и почему неприемлемы другие методы идентификации характеристик систем, которые не требуют, например, проведения специальных экспериментов с изменением входных переменных и построения математических моделей по информации, полученной путем измерений. Этот метод анализа имеет свои преимущества и свое место в приложениях, однако в некоторых случаях физико-математический анализ совершенно необходим. Например, когда объект регулирования еще не существует и нельзя проводить эксперименты и измерения. Кроме того, физико-математический анализ дает возможность судить о том, как некоторые физические и конструктивные параметры влияют на ход динамического процесса. И, наконец, опыт учит, что и при проведении экспериментов на системе и при преимущественном использовании информации, полученной путем измерений на объекте, всегда желательно иметь хотя бы приближенные или качественные результаты физико-математического анализа и производить оценку неизвестного решения.

Иногда физическое описание объекта моделирования устанавливается в результате математического моделирования. Так, математическое моделирование используется для проверки некоторых гипотез о механизме процессов, протекающих в объекте. Для этого в состав модели вводят ис-

следуемые соотношения, чтобы по результатам последующего моделирования судить о справедливости того или иного физического предположения. Например, механизмы каталитических превращений в большинстве случаев неизвестны исследователям. Закладывая в математическую модель тот или иной механизм протекания химической реакции и сравнивая результаты моделирования с экспериментальными, можно отыскать наиболее близкий к истинному механизм.

Например. По материалам статьи «Кинетическая модель механизма компенсированного распада углеводородов на платине».

Рассмотрим механизм реакций, связанных с переработкой углеводородного сырья, дезактивации и регенерации с точки зрения катализа, понимания катализаторов вследствие процессов коксообразования.

Есть экспериментальные данные по различным механизмам коксоотложения, но, достаточно полные и убедительные кинетические модели этих процессов отсутствуют. В первую очередь, это относится к модели отложения углерода на активном компоненте - платине. При этом разработка модели коксообразования на монокристалле платины дает ключ к пониманию механизмов дезактивации нанесенных Pt - содержащих катализаторов риформинга, поскольку механизм коксоотложения на металлическом компоненте является частью более сложной модели закоксования системы «металл – носитель».

В настоящее время известно несколько механизмов коксообразования:

- схема консекутивных реакций, по которой образуются слоистые отложения, например, на носителе катализаторов риформинга - оксиде алюминия;

- механизм карбидного цикла для Ni- и Fe-содержащих катализаторов, согласно которому образование кокса идет через карбидные соединения;
- механизм компенсированного распада углеводородов на платине.

Цели исследования - разработка кинетической модели, позволяющей:

- на основе стадийного механизма качественно объяснить явления, наблюдаемые в эксперименте;

- используя программу оптимизации, решить обратную задачу кинетики - найти такой набор констант скоростей элементарных стадий механизма, который позволяет количественно описать коксоотложение;

- по данным, полученным при различных температурах, рассчитать энергии активации соответствующих стадий, выделить лимитирующие стадии процесса.

Анализ экспериментальных данных и построение модели. На рис. 2.2 представлены кинетические кривые коксонакопления при 770 - 920 К. Поскольку первые участки кривых имеют одинаковый наклон, можно предположить, что механизм отложения углерода, вероятно, один и тот же при небольшом значении покрытия внутри всего температурного интервала.

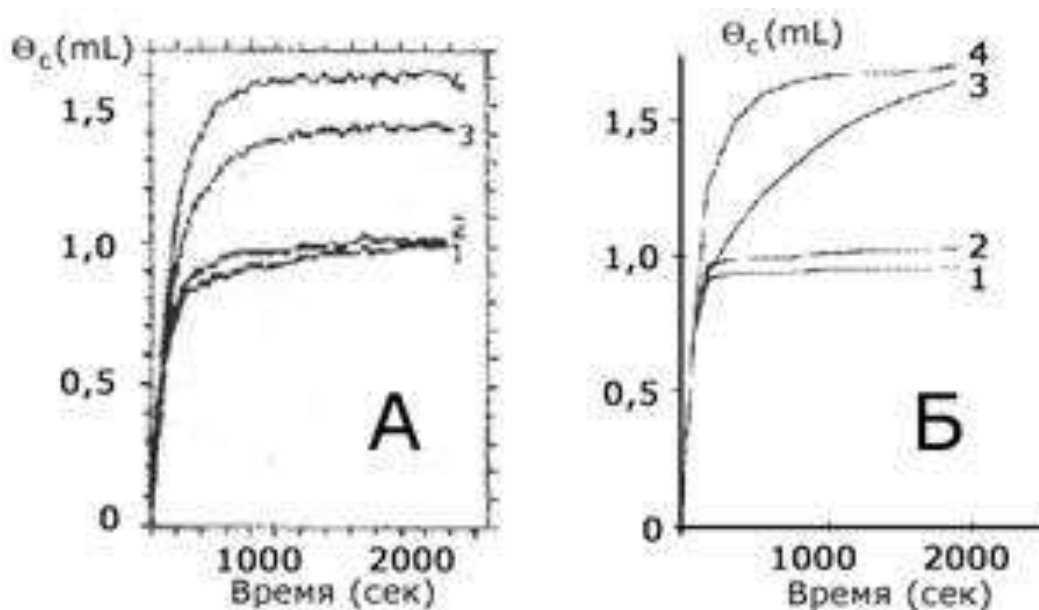


Рис. 2.2. Экспериментальные кривые коксонакопления (А) и смоделированные кривые (Б) в монослоях кокса при температурах: 1-770 К, 2-870 К, 3-895 К, 4-920 К

При этом коксонакопление сильно зависит от температуры образца: при T 900 К S_x становится равным 1,5 монослоя. То есть при низких температурах происходит хемосорбция углеводорода, а при высоких - образование связей С-С, что свидетельствует об образовании дегидрированного плотноупакованного углерода.

Таким образом, на основании экспериментальных и литературных данных вполне вероятным может быть следующее представление механизма компенсированного распада: хемосорбированный углеводород проходит ряд промежуточных дегидрированных форм, внедряется в приповерхностный слой платины, мигрирует по поверхности (или диффундирует в объеме) и откладывается на поверхности в виде плотноупакованных структур, подобных графиту или алмазу. Появление именно такого - плотноупакованного, предельно дегидрированного углерода вызывает дезактивацию платины в катализаторах риформинга. Схема механизма компенсированного распада представлена на рис. 2.3.

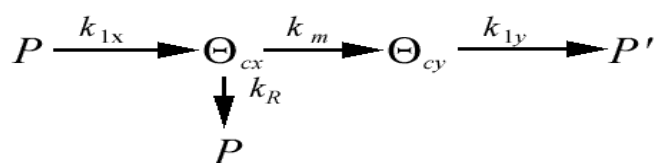


Рис. 2.3. Схема механизма компенсированного распада

Ниже приводится та же схема, но записанная через покрытия,

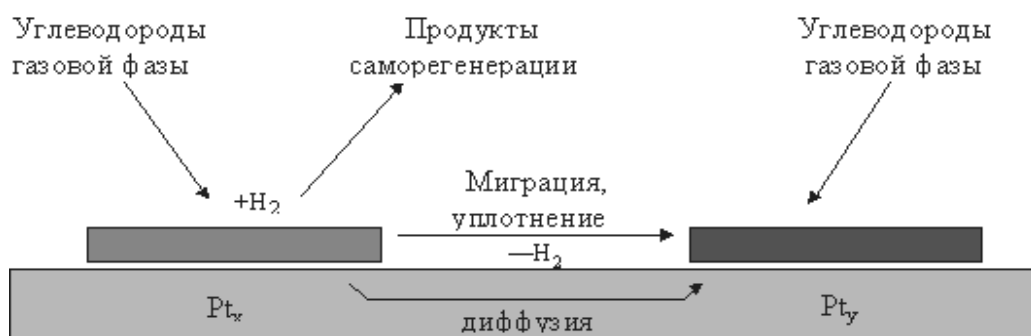


Рис. 2.4. Схема механизма компенсированного распада записанная через покрытия

где P, P' - углеводороды газовой фазы;

θ_{cx}, θ_{cy} - доля закоксованной (деактивированной) поверхности типа X и Y, соответственно;

k_{1x}, k_{1y} - константы скорости отложения монослоя кокса на активные поверхности типа X и Y, соответственно;

k_m, k_R - константы скорости миграции и регенерации.

Общая система уравнений, описывающая механизм компенсированного распада

$$\begin{cases} C_{mx} \frac{d\theta_{cx}}{dt} = \varphi_x (r_{1x} - r_R - r_m) \\ C_{my} \frac{d\theta_{cy}}{dt} = \varphi_y (r_m + r_{1y}) \end{cases}, \quad (2.26)$$

где

$$r_{1x} = k_{1x} C_P (1 - \theta_{cx}); \quad (2.27)$$

$$r_{1y} = k_{1y} C_P (1 - \theta_{cy}); \quad (2.28)$$

$$r_m = k_m C_{cx} (1 - \theta_{cy}); \quad (2.29)$$

$$r_R = k_R C_R \theta_{cx}, \quad (2.30)$$

где C_{mx}, C_{my} - емкость монослоя для центров типа X, Y, соответственно (г/г кат);

C_x, C_y - коксумость для X, Y - центров, соответственно (г/моль), причем со временем состав кокса не меняется, т.е.

$$\varphi_x \neq f(x) \quad \varphi_y \neq f(y), \quad (2.31)$$

где C_P - концентрация углеводорода;

C_R - концентрация регенерирующего агента в газовой фазе.

Рассмотрим частный случай кинетической модели - коксоотложением с учетом миграции.

Пусть скорость миграции определяется только долей свободных мест на Y-поверхности. Тогда скорость миграции $r_m = k_m(1 - Y)$, и система уравнений для X и Y решается аналитически. Общая система уравнений для случая дезактивации с учетом миграции имеет вид (для удобства обозначим $\theta_{cx} = X$, $\theta_{cy} = Y$)

$$\begin{cases} C_{mx} \frac{dX}{dt} = \varphi_x(r_{1x} - r_R - r_m) \\ C_{my} \frac{dY}{dt} = \varphi_y(r_m + r_{1y}) \\ \frac{dC}{dt} = C_{mx} \frac{dX}{dt} + C_{my} \left(\frac{dY}{dt} + \frac{dY_2}{dt} nl \right), \end{cases} \quad (2.32)$$

где Y_2 - доля поверхности типа Y, занятая $n > 1$ слоями кокса.

Для описания экспериментальных данных коксонакопления от времени использовано уравнение кинетической модели, отвечающее зависимости $C = f(t)$. С помощью программы оптимизации решена обратная задача кинетики, т.е. найден такой набор констант скоростей элементарных стадий механизма, который позволяет количественно описать коксоотложение для интервала температур 770 - 920 К.

Графическое сопоставление экспериментальных и модельных кинетических кривых показано на рис. 2.2. Ошибка описания (6 %) не превышает экспериментальной.

Из анализа данных видно, что энергия активации стадии отложения углеводорода из газовой фазы сопоставима с энергией активации адсорбции, а высокое значение энергии активации стадии нуклеации (зародышеобразования) говорит о том, что эта стадия - лимитирующая. При этом не нулевые значения этой константы соответствуют 900 К, что свидетельствует об образовании плотноупакованного углерода лишь при высоких температурах.

В зависимости от назначения модели, возможны различные подходы для составления физического описания объекта. Если мы хотим выявить факторы, влияющие на функционирование системы, то целесообразно начинать с материальных и энергетических балансов технологических потоков, затем рассмотреть математические модели используемого оборудования, и т.п., вплоть до кинетических моделей. Количество «элементарных» процессов будет определяться адекватностью модели объекту. При проектировании, проверке гипотез, оценке влияния определенного фактора на работу всей системы, мы начинаем описание с микроуровня.

Общим для всех математических моделей является то, что число уравнений, включаемых в математическое описание, должно быть равно числу переменных, находимых в результате моделирования.

2. Схема построения математической модели химико-технологического процесса на основе физического описания природы

Схему построения математической модели химико-технологического процесса на основе физического описания природы объекта в первом приближении можно представить таким образом:

1. *Этап составления кинетических уравнений* описывающих «элементарный» процесс химического превращения. Реализация данного этапа требует предварительного изучения сущности химической реакции и возможности применения известных кинетических закономерностей. Затем следует установить механизм реакции, кинетические характеристики и записать кинетические уравнения. Все это осуществляется на базе экспериментальных лабораторных исследований на микроуровне по законам классической кинетики (без учета влияния физических процессов тепло- и массообмена).

Полученные кинетические уравнения, описывающие «элементарный» процесс химического превращения, принято называть кинетической моделью.

2. *Этап выбора типа основного аппарата* (реактора). При проектировании нового процесса следует иметь в виду, что тип аппарата, его размеры, наряду с режимными параметрами, являются также искомыми. В ходе построения модели необходимо произвести выбор типа реактора путем сравнения возможных вариантов с учетом влияния на процесс особенностей конструктивного оформления аппарата. С этой целью могут быть использованы последовательные расчеты нескольких вариантов и выбор лучшего из них, анализ лабораторных кинетических экспериментов, информация о работе реакторов при осуществлении аналогичных процессов и др. В некоторых задачах тип реактора предусматривается исходными требованиями.

3. *Этап составления математического описания «элементарного» процесса перемещения веществ* или построение гидродинамической модели. Для получения уравнений гидродинамической модели необходимо провести всесторонний анализ физической сущности процесса, изучить особенности структуры реагирующей среды (чаще всего движущихся потоков) и принять некоторые допущения, позволяющие упростить зависимости между параметрами и сохранить физическую картину процесса.

4. На следующем *этапе изучаются процессы тепло- и массообмена* и составляются их математические описания в соответствии с гидродинамическим режимом (структурой) движения реакционной среды.

5. В ряде случаев исследуемые процессы могут отличаться какими-либо *особенностями*, которые учитываются при моделировании введением в математическое описание *теоретических, полуэмпирических и эмпириче-*

ских соотношений между параметрами процесса. Например, зависимость, характеризующая особенности растворимости газа в жидкости, зависимость теплоемкости раствора от состава, зависимость коэффициента массопередачи от скорости потоков фаз.

6. При составлении математического описания некоторых процессов необходимо принимать во внимание объективно существующие *ограничения на диапазон изменения ряда параметров*. Например, концентрация любого компонента может быть только положительной величиной.

7. Если по каким-либо соображениям требуется знать *закономерности* протекания процесса *в переходных режимах*, то *дополнительно изучаются* динамические характеристики моделируемого объекта, которые учитывают изменение основных параметров во времени.

8. Заключительным этапом построения математической модели является *объединение описаний* всех исследованных «элементарных» процессов и формализованных других связей между параметрами процесса в единую систему уравнений, связывающих параметры конструктивные, физические и параметры «элементарных» процессов.

Построенная на основе физических представлений модель, должна верно качественно и количественно описывать свойства моделируемого процесса, т.е. она должна быть адекватна моделируемому процессу.

Для *проверки адекватности* математической модели реальному процессу нужно сравнить результаты измерений на объекте в ходе процесса с результатами предсказания модели в идентичных условиях.

3. Основные этапы разработки математической модели

Разработка любой математической модели начинается с определения круга задач, для решения которых она разрабатывается. Поэтому однозначной схемы для различных процессов, объектов химической технологии быть не может.

На рис. 2.5 представлена схема основных этапов разработки математической модели, где, в общем виде, реализуются задачи моделирования: составление уравнений, описываемых изучаемый объект – решение – проверка на адекватность модели объекту.

3.1. Постановка задачи моделирования: выбор цели и критериев

Основным в построении модели является цель. Любой объект, процесс, явление сложны, и для них могут быть построены различные модели в зависимости от задачи, которую предстоит решить.

Неправильная или неполная постановка задачи может свести на нет результаты всех последующих этапов.

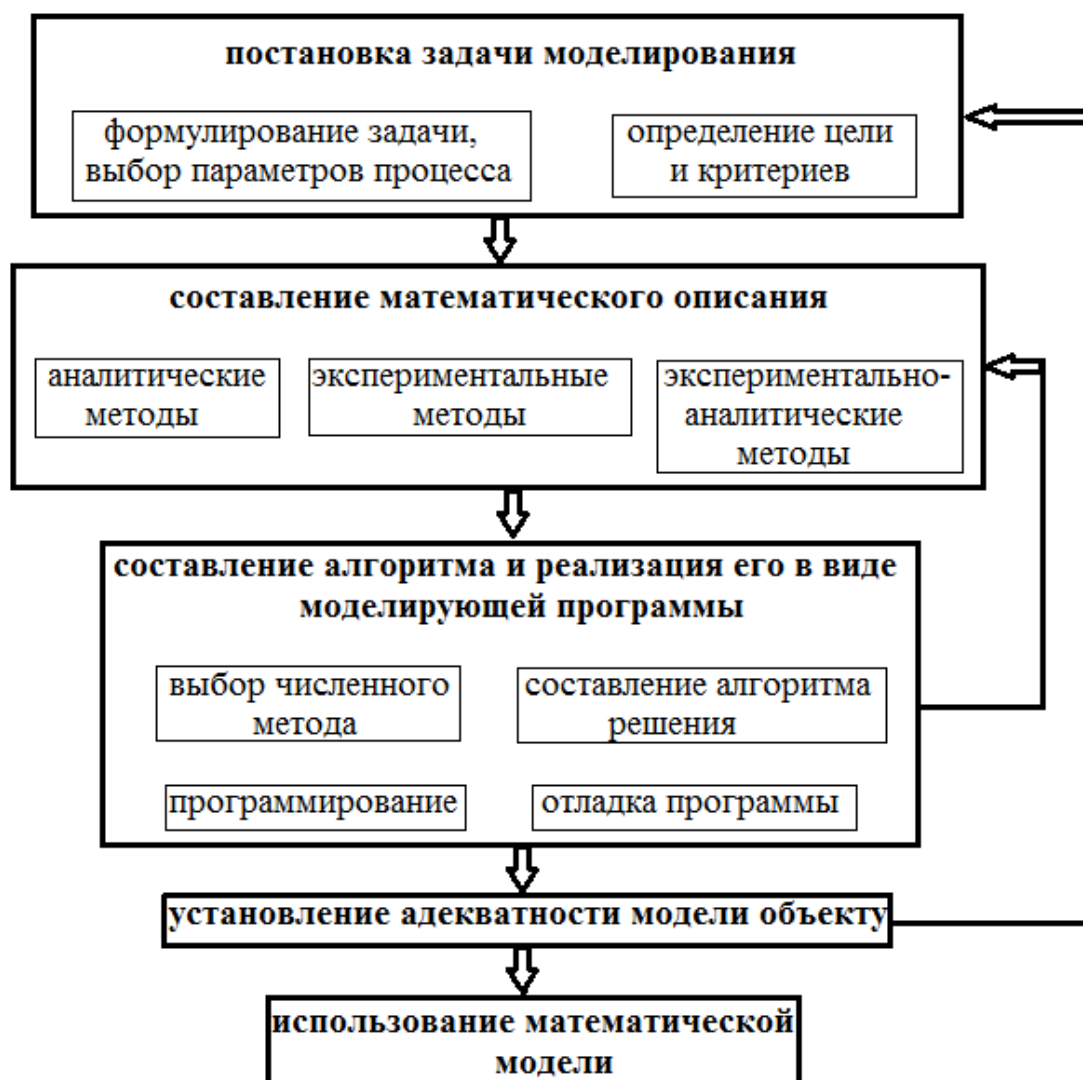


Рис. 2.5. Основные этапы разработки математической модели

Целями построения модели могут быть: гносеологическое моделирование, разработка на базе построенной модели, моделирование системы управления или непосредственное использование модели в системе управления (адаптивное, дуальное управление и др.). Так, если речь идет о предприятии, то для него строятся модели производства, снабжения, связи экономики и многие другие, которые могут быть в той или иной степени связаны или не связаны между собой. При анализе динамических характеристик систем в целях автоматического управления, происходящие в системе процессы, изучают с точки зрения распространения и передачи информации. Целью такого анализа является построение математической модели, которая достаточно точно описывала бы преобразования сигнала - при прохождении его через исследуемую систему.

Изучение любого объекта начинается с вопроса: для чего? Например, исследование коррозионных процессов. Коррозия - это самопроизвольное

разрушение металла вследствие химического или электрохимического взаимодействия с окружающей средой. Как следует из определения, для коррозии необходимы два элемента: металл и среда. Значит, снижение скорости коррозии возможно за счет каких-либо изменений в металле, либо за счет корректировки среды.

В первом случае, контролировать процесс мы будем, исследуя непосредственно сам металл. Во втором случае - контролируем среду, в которой обнаруживаем содержание продуктов коррозии. Методы и средства контроля для этих случаев разные. Поэтому, если формулируем цель: «Снижение скорости коррозии», то изучаем оба процесса, усложняем модель, поскольку необходимо будет исследовать взаимовлияние этих факторов, а значит, дополнительно вводятся системы уравнений и система отягощается факторами, природа которых не исследована. Большая вероятность того, что точность результатов будет низкой. Цель должна быть сформулирована не пространственно красиво, а так, чтобы были поняты необходимые критерии, методы и средства контроля, надежность и точность результатов. Например, если в цели обозначено «влияние гидродинамического режима на коррозию оборудования второго контура при морфолиновом режиме», то обязательно должен присутствовать критерий Рейнольдса.

3.2. Постановка задачи моделирования: формулирование задачи и выбор параметров процесса

Четко сформулированная задача позволяет наилучшим образом формализовать объект. В зависимости от цели исследования может быть несколько задач. Так, обозначенная выше цель исследования предопределяет задачи: анализ типичных коррозионных разрушений оборудования второго контура, особенности ведения морфолинового режима, возможные гидродинамические режимы, обусловленные нормативной документацией. Затем определяем параметры процесса, которые будем контролировать. На АЭС достаточно большое количество контролируемых параметров (рН, общее солесодержание, жесткость, концентрация ионов кальция, железа, температура и т.д.). Мы выбираем те, которые описаны в классических уравнениях (в соответствии с типом задачи), или влияние которых предполагаем анализировать.

3.3. Составление математического описания

На этапе составления математического описания предварительно выделяют основные явления и элементы в объекте и затем устанавливают связи между ними. Далее, для каждого выделенного элемента и явления

записывают уравнение (или систему уравнений), отражающее его функционирование. Кроме того, в математическое описание включают уравнения связи между различными выделенными явлениями. В зависимости от процесса математическое описание может быть представлено в виде системы алгебраических, дифференциальных, интегральных уравнений.

Существуют различные подходы к составлению математического описания модели. В любом случае, граничными являются экспериментальный (эмпирический) подход и аналитический. К экспериментальным методам, в определенном смысле, можно отнести имитационное моделирование, как вариант вычислительного эксперимента. Некоторые авторы отмечают комбинированный (экспериментально-аналитический) метод составления математического описания. Варианты классификации методов зависят от используемых данных и способов их получения.

К основным методам математического описания объектов ХТС мы будем относить: экспериментальные (эмпирические), аналитические, экспериментально-аналитические (комбинированные).

Аналитическими методами составления математического описания обычно называют способы вывода уравнений статики и динамики на основе теоретического анализа физических и химических процессов, происходящих в исследуемом объекте, а также на основе заданных конструктивных параметров аппаратуры и характеристик перерабатываемых веществ.

При выводе этих уравнений используются фундаментальные законы сохранения вещества и энергии, а также кинетические закономерности процессов переноса массы и теплоты, химических превращений.

Для составления математического описания с помощью аналитических методов не требуется проведения каких-либо экспериментов на объекте, поэтому такие методы пригодны для нахождения статических и динамических характеристик вновь проектируемых объектов, физико-химические процессы в которых достаточно хорошо изучены.

Параметры (коэффициенты) составленных уравнений функционально зависят от определяющих размеров химико-технологического аппарата (диаметра, длины и т.д.), свойств обрабатываемых веществ и величин, характеризующих протекание физико-химических процессов (констант скорости реакций, коэффициентов диффузии и др.). Некоторые параметры уравнений могут быть определены расчетным путем, другие находят с помощью принципа подобия по результатам ранее выполненных исследований. Аналитические модели позволяют получать явные функциональные зависимости для искомых величин или определить численные решения для конкретных начальных условий и количественные характеристики модели.

К недостаткам аналитических методов составления математического описания можно отнести сложность решения получающейся системы уравнений при достаточно полном описании объекта.

Экспериментальный метод составления математического описания используется для управления и исследования объектов в узком, «рабочем» диапазоне изменения входных и выходных переменных (например, при построении системы автоматической стабилизации отдельных технологических параметров). Эти методы чаще всего основываются на предположении о линейности и сосредоточенности параметров объекта. Принятие этих допущений позволяет сравнительно просто описывать наблюдаемые процессы алгебраическими или линейными дифференциальными уравнениями с постоянными коэффициентами. При экспериментальном подходе к составлению математического описания всегда требуется постановка опытов непосредственно на изучаемом объекте.

Широкое распространение получили имитационные модели, которые рассматриваются как проводимые на ЭВМ эксперименты с математическими моделями, имитирующими поведение реальных объектов. Особенности функционирования объектов моделирования и вид используемого математического описания определяют непрерывный или дискретный характер модели, цели проектирования - детерминированный или стохастический (вероятностно-статистический) подход к построению модели. Например, для моделирования функций преобразования измерительных устройств достаточно воспользоваться детерминированным способом описания, тогда как для анализа погрешностей, оценки информационных характеристик необходимо применить вероятностно-статистические методы.

Достоинством экспериментальных методов является простота получаемого математического описания при достаточно точном описании свойств объекта в узком диапазоне изменения параметров. Основной недостаток экспериментальных методов - невозможность установления функциональной связи между входящими в уравнения числовыми параметрами и конструктивными характеристиками объекта, режимными параметрами процесса, физико-химическими свойствами веществ. Кроме того, полученное экспериментальным методом математическое описание нельзя распространять на другие однотипные объекты.

Наличие «сильных» и «слабых» сторон аналитического и экспериментального методов составления математического описания привело к необходимости разработки комбинированного *экспериментально-аналитического* метода. Сущность его заключается в аналитическом составлении уравнений описания, проведении экспериментальных исследований и нахождения по их результатам параметров уравнений. При подобном подходе к получению математического описания сохраняются многие положительные свойства экспериментальных и аналитических методов.

Математическую модель объекта регулирования в принципе можно определить двумя совершенно различными методами. На основании конструктивных и технологических данных о системе можно приближенно

математически описать по отдельности простейшие процессы, происходящие в системе. Таким образом, получается система уравнений, которая определяет математическую модель объекта регулирования. С другой стороны, для анализа можно использовать информацию, полученную путем измерений на объекте. Пользуясь такой информацией, также можно считать математическую модель системы.

После составления математического описания и постановки в случае необходимости соответствующих начальных и граничных условий необходимо выбрать метод решения, разработать алгоритм и составить программу решения системы уравнений математического писания.

3.4. Составление алгоритма и реализация его в виде моделирующей программы

Этап выбора метода решения и разработки моделирующей программы подразумевает выбор наиболее эффективного метода решения из имеющихся (под эффективностью имеются в виду быстрота получения и точность решения) и реализацию его сначала в форме алгоритма решения, а затем - в форме программы, пригодной для расчета на ЭВМ.

Выбор типа математической модели определяет направление всего исследования. Обычно последовательно строится несколько моделей. Сравнение результатов их исследования с реальностью позволяет установить наилучшую из них. На этапе выбора типа математической модели при помощи анализа данных поискового эксперимента устанавливаются: линейность или нелинейность, динамичность или статичность, стационарность или нестационарность, а также степень детерминированности исследуемого объекта или процесса.

Процесс выбора математической модели объекта заканчивается ее предварительным контролем, который также является первым шагом на пути к исследованию модели. При этом осуществляются следующие виды контроля (проверки): размерностей, порядков, характера зависимостей, экстремальных ситуаций, граничных условий, математической замкнутости, физического смысла, устойчивости модели.

Контроль размерностей сводится к проверке выполнения правила, согласно которому приравняться и складываться могут только величины одинаковой размерности.

Контроль порядков величин направлен на упрощение модели. При этом определяются порядки складываемых величин и явно малозначительные слагаемые отбрасываются.

Анализ характера зависимостей сводится к проверке направления и скорости изменения одних величин при изменении других. Направления и скорость, вытекающие из математической модели, должны соответствовать физическому смыслу задачи.

Анализ экстремальных ситуаций сводится к проверке наглядного смысла решения при приближении параметров модели к нулю или бесконечности.

Контроль граничных условий состоит в том, что проверяется соответствие математической модели граничным условиям, вытекающим из смысла задачи. При этом проверяется, действительно ли граничные условия поставлены и учтены при построении искомой функции и что эта функция на самом деле удовлетворяет таким условиям.

Анализ математической замкнутости сводится к проверке того, что математическая модель дает однозначное решение.

Анализ физического смысла сводится к проверке физического содержания промежуточных соотношений, используемых при построении математической модели.

Проверка устойчивости модели состоит в проверке того, что варьирование исходных данных в рамках имеющихся данных о реальном объекте не приведет к существенному изменению решения.

Этап программирования обычно завершается составлением описания программы, в котором указываются все переменные и соответствующие идентификаторы, входные и выходные переменные, порядок ввода и вывода информации.

3.5. Установление адекватности модели объекту

Пригодность математической модели для решения задач исследования характеризуется тем, в какой степени она обладает так называемыми целевыми свойствами, основными из которых являются адекватность, устойчивость и чувствительность.

В общем случае под *адекватностью* понимают степень соответствия модели тому реальному явлению или объекту, для описания которого она строится.

Вместе с тем, создаваемая модель ориентирована, как правило, на исследование определенного подмножества свойств этого объекта. Поэтому можно считать, что адекватность модели определяется степенью ее соответствия не столько реальному объекту, сколько целям исследования. В наибольшей степени это утверждение справедливо относительно моделей проектируемых систем (т.е. в ситуациях, когда реальная система вообще не существует).

Тем не менее, во многих случаях полезно иметь формальное подтверждение (или обоснование) адекватности разработанной модели. Один из наиболее распространенных способов такого обоснования - использование методов математической статистики. Суть этих методов заключается в проверке выдвинутой гипотезы (в данном случае - об адекватности моде-

ли) на основе некоторых статистических критериев. При этом следует заметить, что при проверке гипотез методами математической статистики необходимо иметь в виду, что статистические критерии не могут доказать ни одной гипотезы - они могут лишь указать на отсутствие опровержения.

Процедура оценки адекватности разработанной модели реально существующей системе основана на сравнении измерений на реальной системе и результатов экспериментов на модели, и может проводиться различными способами. Наиболее распространенные из них:

- по средним значениям откликов модели и системы;
- по дисперсиям отклонений откликов модели от среднего значения откликов системы;
- по максимальному значению относительных отклонений откликов модели от откликов системы.

Названные способы оценки достаточно близки между собой, по сути, поэтому ограничимся рассмотрением первого из них. При этом способе проверяется гипотеза о близости среднего значения наблюдаемой переменной Y среднему значению отклика реальной системы Y^* .

В результате N_0 опытов на реальной системе получают множество значений (выборку) Y^* . Выполнив N_M экспериментов на модели, также получают множество значений наблюдаемой переменной Y .

Затем вычисляются оценки математического ожидания и дисперсии откликов модели и системы, после чего выдвигается гипотеза о близости средних значений величин Y^* и Y (в статистическом смысле). Основой для проверки гипотезы является t -статистика (распределение Стьюдента). Ее значение, вычисленное по результатам испытаний, сравнивается с критическим значением $t_{кр}$, взятым из справочной таблицы. Если выполняется неравенство $t_n < t_{кр}$, то гипотеза принимается. Статистические методы применимы только в том случае, если оценивается адекватность модели существующей системе.

На проектируемой системе провести измерения, естественно, не представляется возможным. Единственный способ преодолеть это препятствие заключается в том, чтобы принять в качестве эталонного объекта концептуальную модель проектируемой системы. Тогда оценка адекватности программно реализованной модели заключается в проверке того, насколько корректно она отражает концептуальную модель.

Оценка устойчивости. При проверке адекватности модели как существующей, так и проектируемой системы реально может быть использовано лишь ограниченное подмножество всех возможных значений входных параметров (рабочей нагрузки и внешней среды). В связи с этим для обоснования достоверности получаемых результатов моделирования большое значение имеет проверка устойчивости модели. В теории моделирования это понятие трактуется следующим образом.

Устойчивость модели - это ее способность сохранять адекватность при исследовании эффективности системы на всем возможном диапазоне рабочей нагрузки, а также при внесении изменений в конфигурацию системы.

Универсальной процедуры проверки устойчивости модели не существует. Разработчик вынужден прибегать к методам «для данного случая», частичным тестам и здравому смыслу. Часто полезна апостериорная проверка. Она состоит в сравнении результатов моделирования и результатов измерений на системе после внесения в нее изменений. Если результаты моделирования приемлемы, уверенность в устойчивости модели возрастает.

В общем случае можно утверждать, что чем ближе структура модели структуре системы и чем выше степень детализации, тем устойчивее модель. Устойчивость результатов моделирования может быть также оценена методами математической статистики. Здесь уместно вспомнить основную задачу математической статистики, которая заключается в том, чтобы проверить гипотезу относительно свойств некоторого множества элементов, называемого генеральной совокупностью, оценивая свойства какого-либо подмножества генеральной совокупности (то есть выборки). В генеральной совокупности исследователя обычно интересует некоторый признак, который обусловлен случайностью и может иметь качественный или количественный характер.

В данном случае именно устойчивость результатов моделирования можно рассматривать как признак, подлежащий оценке. Для проверки гипотезы об устойчивости результатов может быть использован *критерий Уилкоксона*, который служит для проверки того, относятся ли две выборки к одной и той же генеральной совокупности (т.е. обладают ли они одним и тем же статистическим признаком). Например, в двух партиях некоторой продукции измеряется определенный признак и требуется проверить гипотезу о том, что этот признак имеет в обеих партиях одинаковое распределение; другими словами, необходимо убедиться, что технологический процесс от партии к партии изменяется несущественно. При статистической оценке устойчивости модели соответствующая гипотеза может быть сформулирована следующим образом: при изменении входной (рабочей) нагрузки или структуры математической модели закон распределения результатов моделирования остается неизменным.

Оценка чувствительности. Очевидно, что устойчивость является положительным свойством модели. Однако если изменение входных воздействий или параметров модели (в некотором заданном диапазоне) не отражается на значениях выходных параметров, то польза от такой модели невелика. В связи с этим возникает задача оценивания чувствительности модели к изменению параметров рабочей нагрузки и внутренних параметров самой системы.

Такую оценку проводят по каждому параметру модели в отдельности. Основана она на том, что обычно диапазон возможных изменений параметра известен. Данные, полученные при оценке чувствительности модели, могут быть использованы, в частности, при планировании экспериментов: большее внимание должно уделяться тем параметрам, по которым модель является более чувствительной.

3.6. Использование математической модели

Возможность использования модели для теоретических и практических целей приводит к требованию наиболее простой в каком-либо смысле модели (по размерности, порядку дифференциального уравнения, скорости реализации на ЭВМ и др.). Создание для данного объекта простой модели по сравнению с общей теоретической моделью возможно в связи с тем, что для конкретного объекта класс входных сигналов уже, внешние возмущения конкретны, диапазоны функционирования и состояния объекта не столь широки и т.д. Разумным требованием в первую очередь является представление данного объекта с помощью хорошо изученных моделей. Разработку специализированной модели следует осуществлять только в особо обоснованных случаях.

При построении систем оптимального регулирования или оптимального управления необходима информация о динамических характеристиках объектов регулирования (управления). Такая информация представляет собой набор сведений, позволяющих описать в явном виде динамику объекта регулирования с помощью математической модели (дифференциальное уравнение, передаточная функция и т.д.) или, в случае оптимального регулирования, непосредственно выбрать регулятор по заданному критерию. Если характеристики объекта регулирования не меняются, то можно раз навсегда построить математическую модель или оптимальный регулятор. Если же динамические характеристики системы изменяются во времени, то построения математической модели и соответственно оптимального регулятора осуществляется в процессе регулирования. Построение математической модели объекта регулирования называется идентификацией объекта регулирования независимо от того, исследуется ли структура и значения коэффициентов или оцениваются параметры системы с заданной или выбранной структурой.

Для обеспечения оптимального регулирования не всегда требуется строить математическую модель в явном виде. Тем не менее, необходимо иметь, возможно, более полную информацию о динамике системы, притом в таком виде, чтобы можно было простейшим способом достичь оптимального управления. Следовательно, различные концепции построения оптимальных систем регулирования приводят к разным способам исполь-

зования информации о динамике регулируемых систем. При построении математической модели, которая затем применяется для синтеза регулятора, используются одни способы, а в адаптивных системах регулирования – другие; в дуальных системах управления – третьи, в самообучающихся – четвертые и т.д. В то время как методы построения адаптивных, дуальных и самообучающихся систем регулирования главным образом составляют предмет исследований и лабораторных экспериментов, методы синтеза систем регулирования (управления) теоретически разработаны для самых различных вариантов, и, кроме того, имеются многочисленные практические применения. Эти методы основаны на предположении, что динамические характеристики объектов регулирования определены предварительно, точнее, что математическая модель объекта регулирования известна априори. Следует отметить, что в адаптивных, дуальных и самообучающихся системах управления также может потребоваться априорное знание приближенной математической модели объекта регулирования, которая может оказаться очень полезной. Чем точнее математическое описание динамических характеристик системы, тем лучшую сходимость обеспечивают эти методы в процессе адаптации и тем меньше объем или сложность необходимых вычислений.

Кроме того, применение средств вычислительной техники для регулирования взаимосвязанных промышленных процессов осуществляется значительно легче, если предварительно известна математическая модель объекта регулирования.

4. Этапы вычислительного эксперимента. Компьютерное моделирование

В настоящее время основным способом исследования математической модели и проверки ее качественных показателей служит вычислительный эксперимент.

Вычислительным экспериментом называется методология и технология исследований, основанные на применении прикладной математики и ЭВМ как технической базы при использовании математической модели. Вычислительный эксперимент основывается на создании математической модели изучаемых объектов, которые формируются с помощью некоторой особой математической структуры, способной отражать свойства объекта, проявляемые им в различных экспериментальных условиях, и включает в себя следующие этапы.

1. Для исследуемого объекта *строится модель*, обычно сначала *физическая*, фиксирующая разделение всех действующих в рассматриваемом явлении факторов на главные и второстепенные, которые на данном этапе исследования отбрасываются. Одновременно формулируются допущения и

условия применимости модели, границы, в которых будут справедливы полученные результаты. Модель записывается в математических терминах, как правило, в виде дифференциальных или интегро-дифференциальных уравнений. Создание математической модели проводится специалистами, хорошо знающими данную область естествознания или техники, а также математиками, представляющими себе возможности решения математической задачи.

2. Разрабатывается метод решения сформулированной математической задачи. Эта задача представляется в виде совокупности формул, по которым должны вестись вычисления и условия, показывающие последовательность применения этих формул; набор этих формул и условий носит название *вычислительного алгоритма*. Вычислительный эксперимент имеет многовариантный характер, так как решения поставленных задач часто зависят от многочисленных входных параметров. Тем не менее, каждый конкретный расчет в вычислительном эксперименте проводится при фиксированных значениях всех параметров. Между тем в результате такого эксперимента часто ставится задача определения оптимального набора параметров. Поэтому при создании оптимальной установки приходится проводить большое число расчетов однотипных вариантов задачи, отличающихся значением некоторых параметров. В связи с этим при организации вычислительного эксперимента можно использовать эффективные численные методы.

3. Разрабатываются *алгоритм и программа решения задачи* на ЭВМ. Программирование решений определяется теперь не только искусством и опытом исполнителя, а перерастает в самостоятельную науку со своими принципиальными подходами.

4. Проведение *расчетов на ЭВМ*. Результат получается в виде некоторой цифровой информации, которую далее необходимо будет расшифровать. Точность информации определяется при вычислительном эксперименте достоверностью модели, положенной в основу эксперимента, правильностью алгоритмов и программ (проводятся предварительные «тестовые» испытания).

5. *Обработка результатов расчетов, их анализ и выводы*. На этом этапе могут возникнуть: необходимость уточнения математической модели (усложнения или, наоборот, упрощения), предложения по созданию упрощенных инженерных способов решения и формул, дающих возможности получить необходимую информацию более простым способом.

Вычислительный эксперимент приобретает исключительное значение в тех случаях, когда натурные эксперименты и построение физической модели оказываются невозможными.

Особенно ярко можно проиллюстрировать значение вычислительного эксперимента при исследовании влияния городской застройки на парамет-

ры распространения радиосигнала. В связи с интенсивным развитием систем мобильной связи данная задача в настоящее время является особенно актуальной.

В целях снижения затрат при частотно-территориальном планировании производится оптимизация частотно-территориального плана с учетом таких факторов как рельеф местности, конфигурация городской застройки, атмосферные воздействия. Кроме этого, с учетом динамичности развития города необходимо постоянное уточнение соответствующих моделей. То, что принято называть уровнем сигнала (средняя напряженность электромагнитного поля) представляет собой результат сложного взаимодействия физических процессов, протекающих при распространении сигнала: прохождение сигнала сквозь здания и сооружения; воздействие на сигнал помех искусственного и естественного происхождения; атмосферная рефракция сигнала; отражения сигнала от зданий и от земной поверхности; потери энергии сигнала в осадках и др.

В данном случае окружающую среду можно исследовать, строя соответствующую математическую модель, которая должна позволять предсказывать уровень сигнала при заданной конфигурации застройки, рельефе местности, погодных условиях и т.п. Масштабы среды распространения сигнала настолько грандиозны, что эксперимент даже в одном каком-то регионе требует существенных затрат.

Таким образом, глобальный эксперимент по исследованию распространения сигнала возможен, но не натурный, а вычислительный, проводящий исследования нереальной системы (окружающей среды), а ее математической модели. В науке и технике известно немало областей, в которых вычислительный эксперимент оказывается единственно возможным при исследовании сложных систем.

Изучая сложные технологические процессы, аппараты и физико-химические явления, мы не можем учесть все факторы: какие-то оказываются существенными, а какими-то можно пренебречь. При этом выдвигается система допущений (гипотез), которая тщательно обосновывается и позволяет выявить и учесть при математическом описании наиболее характерные черты исследуемого объекта. В результате формируется математическая модель исследуемого технологического объекта.

В процессе компьютерного моделирования исследователь имеет дело с тремя объектами: *системой* (реальной, проектируемой, воображаемой), *математической моделью* и *программой ЭВМ*, реализующей алгоритм решения уравнений модели.

Традиционная схема компьютерного моделирования как единого процесса построения и исследования модели, имеющего соответствующую программную поддержку, может быть представлена в виде совокупности этапов. Исходя из того, что компьютерное моделирование применяется для

исследования, оптимизации и проектирования реальных технологических объектов (систем), можно выделить следующие этапы этого процесса:

- 1) определение объекта – установление границ, ограничений и измерителей эффективности функционирования объекта;
- 2) формализацию объекта (построение модели) – переход от реально-го объекта к некоторой логической схеме (абстрагирование);
- 3) подготовку данных – отбор данных, необходимых для построения модели, и представление их в соответствующей форме;
- 4) разработку моделирующего алгоритма и программы ЭВМ;
- 5) оценку адекватности – повышение до приемлемого уровня степени уверенности, с которой можно судить относительно корректности выводов о реальном объекте, полученных на основании обращения к модели;
- 6) стратегическое планирование – планирование вычислительного эксперимента, который должен дать необходимую информацию;
- 7) тактическое планирование – определение способа проведения каждой серии испытаний, предусмотренных планом эксперимента;
- 8) экспериментирование – процесс осуществления имитации в целях получения желаемых данных и анализа чувствительности;
- 9) интерпретацию – построение выводов по данным, полученным путем имитации;
- 10) реализацию – практическое использование модели и результатов моделирования;
- 11) документирование – регистрация хода осуществления процесса компьютерного моделирования и его результатов, а также документирование этого процесса.

Перечисленные этапы компьютерного моделирования определены в предположении, что сформулированная задача может быть решена наилучшим образом именно этим методом. Однако, это может быть не самый эффективный метод.

В том случае, если задача может быть сведена к простой линейной модели и решена *аналитически*, нет никакой нужды в компьютерном моделировании. Следует изыскивать все возможные средства, подходящие для решения данной конкретной задачи, стремясь при этом к оптимальному сочетанию стоимости и желаемых результатов. Поэтому прежде чем приступать к оценке возможностей компьютерного моделирования, следует самому убедиться, что простая аналитическая модель для данного случая не пригодна.

Пример. Рассмотрим алгоритм расчета аппарата идеального вытеснения, в котором протекает реакция



Математическое описание аппарата в стационарном режиме работы имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \frac{v}{s} \cdot \frac{dC_A}{dt} = -kC_A C_B \\ \frac{v}{s} \cdot \frac{dC_B}{dt} = -kC_A C_B \\ C_A = C_A^0, \quad C_B = C_B^0, \quad \text{при } x = 0 \end{cases} . \quad (2.34)$$

Будем считать, что реакция протекает в изотермических условиях. Тогда система обыкновенных дифференциальных уравнений (2.34) может быть решена с помощью метода Эйлера. Для этого приводим ее к виду

$$\frac{dC_A}{dt} = -\frac{s}{v} k C_A C_B = f_1(C_A, C_B) ; \quad (2.35)$$

$$\frac{dC_B}{dt} = -\frac{s}{v} k C_A C_B = f_2(C_A, C_B) . \quad (2.36)$$

Согласно методу Эйлера, искомые концентрации C_A и C_B определяются по формулам

$$C_A = C_A^0 + \Delta x(C_A, C_B); \quad (2.37)$$

$$C_B = C_B^0 + \Delta x(C_A, C_B) . \quad (2.38)$$

Графический алгоритм решения (блок-схема) системы уравнений (2.35 – 2.36) представлен на рис. 2.6.

Тот же алгоритм решения, выраженный в пошаговой форме, имеет вид

1. Задают C_{A0} , C_{B0} , Δx , k , s , v , l .
2. Находят $x = x + \Delta x$.
3. Проверяют условие на окончание интегрирования ($x > 1$). Если оно выполнено, то выводят результаты и переходят к п.7.
4. Рассчитывают правые части $f_1(C_A, C_B)$, $f_2(C_A, C_B)$.
5. Определяют новые концентрации C_A , C_B .
6. Переходят к п.2.
7. Оканчивают расчет.

Далее на основании алгоритма записывают программу на одном из языков высокого уровня.

Итак, математическое моделирование можно рассматривать как средство изучения реальной системы путем ее замены более удобной для экспериментального исследования моделью, сохраняющей существенные черты оригинала.

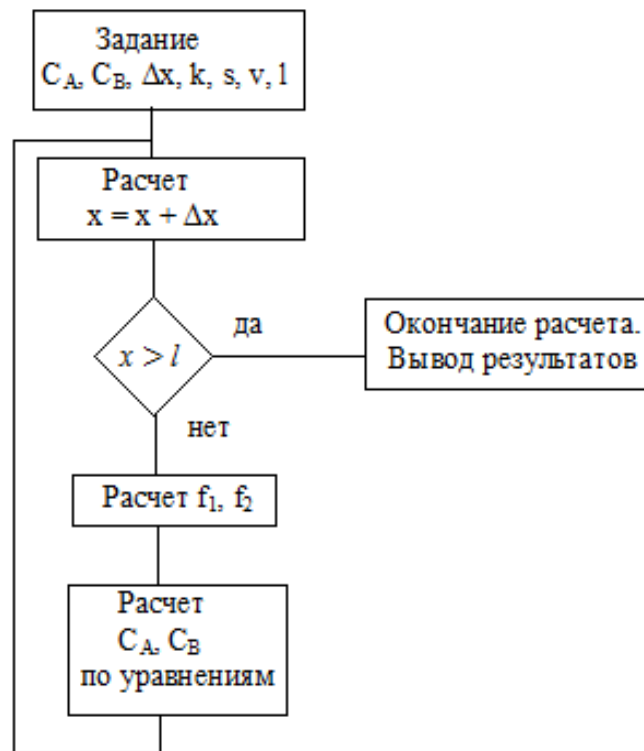


Рис. 2.6. Блок-схема алгоритма расчета РИВ по методу Эйлера

При моделировании производится аппроксимация функции описания более простой и удобной для практического анализа функцией моделью.

Итак, математическая модель является не только базой для разработки системы управления. Модель тесно связана с решением комплекса задач, относящихся к автоматизации данного процесса, хотя она строится в основном для решения задач управления.

На базе построенной математической модели осуществляются изменения технологического процесса, уточняются режимы работы и маршруты получения заданного продукта, решаются задачи выбора оптимальных в определении смысла межоперационных требований на полуфабрикаты и допустимые отклонения от них. Устанавливаются рациональные методы межоперационного контроля и контроля готового продукта и др. На основе результатов моделирования в случае необходимости намечаются направления модернизации существующего процесса в целях использования оптимальных технологических схем получения продукта. Кроме того, для вновь разработанных процессов модели служат основой для одновременного создания объекта и системы управления.

Составление математических моделей объектов химической технологии осуществляется по этапам, количество которых определяется сложностью изучаемого объекта, наличием сведений о связях между его парамет-

рами и другой полезной информацией. Однако независимо от содержания, количества и последовательности возможных этапов, в ходе математического моделирования объектов химической технологии всегда приходится решать три основные задачи: составление математической модели, нахождение ее решения и проверка адекватности модели изучаемому процессу.

При разработке математической модели вначале определяют цели, критерии, задачи и параметры процесса. На основании физического описания природы объекта выражают этот процесс в виде математической записи, связывающей основные параметры, влияющие на процесс, с учетом граничных условий.

Математическое описание составляется на основе законов физики, химии и пр., характеризующих динамику и статику процессов в исследуемом объекте, выражается на языке любых разделов математики. Наибольшее распространение при построении детерминированных моделей получили алгебраические уравнения, обыкновенные дифференциальные уравнения и дифференциальные уравнения в частных производных, матричная алгебра. При стохастическом моделировании, когда учитывается случайный характер процессов, используют методы теории вероятностей и математической статистики.

Если априорные сведения об объекте недостаточны, вид математических моделей уточняется с помощью методов многомерной статистики: регрессионного, корреляционного, многофакторного и других анализов, а также проведения пассивного или активного экспериментов.

При помощи алгоритма изменяются различные параметры в необходимом направлении, выбираются оптимальные условия и устанавливается адекватность (соответствие) модели изучаемому объекту.

В ходе проверки адекватности модели объекту устанавливается полнота математического описания, достоверность получаемой информации. В частности, об адекватности модели можно судить по результатам полученных с ее помощью прогнозных данных.

Кроме того, при оценке адекватности проверяют:

- 1) полноту отражения моделью свойств реального объекта;
- 2) соответствие модели исходной информации;
- 3) корректность принятых при моделировании допущений и ограничений;
- 4) правильность используемых логических и математических соотношений (функций).

При необходимости в модель вносятся соответствующие коррективы.

В настоящее время основным способом исследования математических моделей и проверки ее качественных показателей служит вычислительный эксперимент.

Вопросы самоконтроля

1. Что представляет собой физическое описание природы объекта?
2. Основные группы уравнений математического описания, разработанного на основе физической природы моделируемого объекта.
3. Логическая схема построения математической модели химико-технологического процесса.
4. Какие группы уравнений можно выделить в составе математического описания, разработанного на основе физической природы моделируемого объекта?
5. Что характеризует группа уравнений сохранения массы и энергии, записанная с учетом гидродинамической структуры движения потоков?
6. Описания каких процессов относятся к группе уравнений элементарных процессов для локальных элементов потоков?
7. Назовите теоретические, полуэмпирические или эмпирические соотношения между различными параметрами процесса.
8. Чем определяются ограничения на параметры процесса?
9. Как осуществляется этап составления кинетических уравнений?
10. Как осуществляется этап выбора типа основного аппарата?
11. Как осуществляется этап построения гидродинамической модели?
12. Особенности изучения процессов тепло- и массообмена при составлении математического описания.
13. Как учитываются особенности исследуемых процессов?
14. Какие могут быть ограничения на диапазон изменения ряда параметров?
15. В каких случаях изучаются динамические характеристики моделируемого объекта?
16. Что представляют собой процессы химической технологии?
17. Основные этапы математического моделирования.
18. Основные этапы составления математического описания.
19. Что понимают под адекватностью модели?
20. Как оценивается устойчивость модели?
21. На чем основана оценка чувствительности модели?
22. Что представляет собой вычислительный эксперимент?
23. Алгоритм расчета аппарата идеального вытеснения, в котором протекает реакция $B + A \rightarrow P$ методом Эйлера.

Литература

1. Бельков В.П. Математические модели химико-технологических процессов / В.П. Бельков, В.В. Шестопапов, В.В. Кафаров. - Ч.2. - М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева, 1981. – 40 с.

2. *Бондарь А.Г.* Математическое моделирование в химической технологии / А.Г. Бондарь. – К.: Высшая школа, 1973. – 280 с.

3. *Гартман Т.Н.* Решение типовых задач по моделированию и оптимизации / Т.Н. Гартман, А.И. Новиков, Н.Н. Цуканова, Ю.К. Щипин / Под ред. А.И. Боянрова. - М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева, 1980. – 80 с.

4. *Дворецкий Д.С.* Компьютерное моделирование биотехнологических процессов и систем / Д.С. Дворецкий, С.И. Дворецкий, Е.И. Муратова, А.А. Ермаков. – Тамбов: ТГТУ, 2005. – 80 с.

5. *Закгейм А.Ю.* Введение в моделирование химико-технологических процессов / А.Ю. Закгейм. – М.: Химии, 1982. – 288 с.

6. *Кафаров В.В.* Математическое моделирование основных процессов химических производств / В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. – М.: Высшая школа, 1991. – 386 с.

7. Кинетическая модель механизма компенсированного распада углеводородов на платине.

<http://articles.excelion.ru/science/biology/65523800.html>

8. Математическое моделирование систем связи: учеб. пособие / К.К. Васильев, М.Н. Служивый. – Ульяновск: Ул. ГТУ, 2008. – 170 с.

9. Математическое описание элементов ХТС в современных программных продуктах. Модели и моделирование.

http://mm.lti-gti.ru/works_lectures/SAXT/7.htm

10. Научная библиотека избранных естественнонаучных изданий.
http://www.sernam.ru/book_mm.php?id=10

11. *Федорова С.А.* Основные этапы составления математических моделей / С.А. Федорова. - Севастополь:СИЯЭиП, 2000. – 28 с.

12. *Федорова С.А.* Методические указания по математическому моделированию и применению ЭВМ в химической технологии для студентов заочной формы обучения / С.А. Федорова. – Севастополь: СНИЯЭиП, 2003. – 68 с.

13. *Чермак И.* Динамика регулируемых систем в теплоэнергетике и химии / И Чермак, В. Петерка, И. Заворка. – М.: Мир, 1972. – 623 с.

Л е к ц и я № 3

ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКАЯ СИСТЕМА КАК ОБЪЕКТ РЕГУЛИРОВАНИЯ

В большинстве случаев решение и анализ математических моделей аналитическими методами невозможны. Эффективность математического моделирования с использованием средств ВТ заключается главным образом в огромных преимуществах ЭВМ, которые не только значительно ускоряют расчетные работы, но и открывают совершенно новые возможности в области исследований. На таких реальных математических моделях можно всесторонне исследовать физико-химические закономерности процесса и масштабировать опытные данные для промышленного аппарата.

1. Основные понятия и определения кибернетики

Кибернетика как область знаний начала формироваться в середине XX в.в. на основе достижений математики, теории вероятностей, электроники, автоматики и телемеханике, лингвистики, биологии и других наук. Впервые принципы кибернетики были сформулированы Норбертом Винером - математиком, профессором Массачусетского технологического института (США) в книге «Кибернетика, или управление и связь в животном и машине» (1948 г.).

По оценке самого автора эта книга имеет предварительный, вводный характер, поскольку не содержит подробного и систематического построения новой науки. В ней приводятся размышления, догадки, гипотезы, аналогии, сложные формулы и математические записи, доступные лишь лицам, имеющим специальную математическую подготовку. Широкие обобщения автора и утверждения, что кибернетика даст возможность объединить и упорядочить огромный материал из разных областей знаний, позволит наладить сотрудничество ученых различных специальностей и вооружит их общим языком, общей методикой. Многие выводы Винер сделал на основе наблюдений между живым (человеком) и машиной. Он установил аналогии в этом взаимодействии, пользуясь материалами и выводами физиологов, физиков, механиков. Сравнивая функции автоматических устройств, которые в то время уже широко использовались, особенно в военном деле, с функциями живых организмов, суммируя свои многолетние научные поиски и обширный материал физиологов, физиков, математиков, *Винер* пришел к основным понятиям *кибернетики*, которую назвал *наукой о связи, управлении и контроле в машинах и живых организмах*.

В отличие от таких наук, как физика, химия, которые занимаются

установлением и изучением общих свойств, строения, превращения материи и основных форм ее движения, кибернетика изучает законы преобразования информации в процессах управления.

Академик А.Н. Колмогоров в 1958 г. дал определение новой науки, в котором более отчетливо подчеркивается своеобразие кибернетики и центральное значение для нее понятия информации. Согласно определению Колмогорова, *кибернетика - это наука, изучающая системы любой природы, способные воспринимать, хранить и перерабатывать информацию и использовать ее для управления и регулирования.*

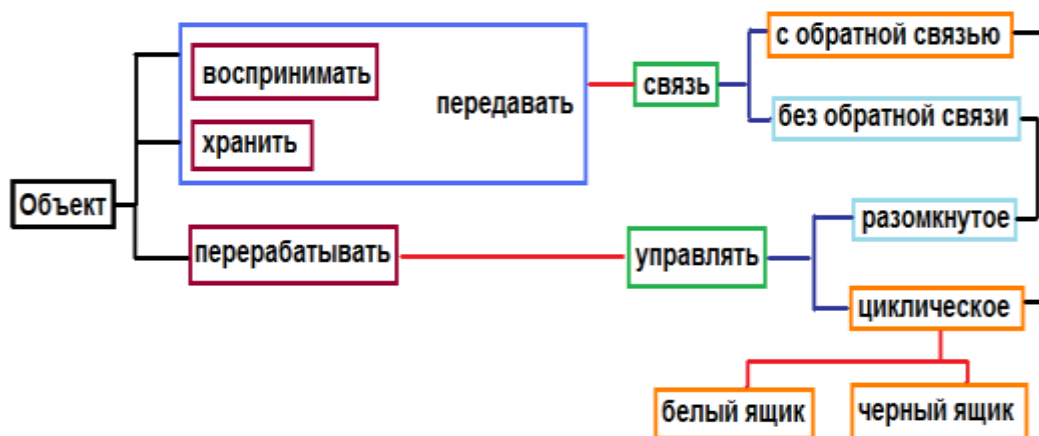


Рис. 3.1. Схема основных понятий кибернетики

Информация - одно из основных понятий кибернетики. *Под информацией* понимают сведения о результатах каких-либо событий, определяющих течение изучаемого процесса. Такое определение обычно применяется в прикладных целях при расчетах химико-технологических систем.

Различают *структурную информацию*, характеризующую внутреннее состояние системы, и *относительную* (внешнюю) информацию, проявляющуюся при соприкосновении двух объектов.

Кибернетика утверждает единство законов управления, где бы они не протекали, и изучает машины, живые организмы и их объединения исключительно с точки зрения их способности воспринимать определенную информацию, сохранять ее в «памяти», передавать по каналам связи и перерабатывать в сигналы, направляющие их деятельность в соответствующую сторону. Такие понятия, как «связь», «управление», «контроль», в кибернетике имеют вполне четкие определения.

Связью в кибернетике называются процессы восприятия информации, ее хранения и передачи.

Управление - это переработка воспринятой информации в сигналы, направляющие деятельность машин и организмов. Если машина или организм способны воспринимать и использовать информацию о результатах своей деятельности, то говорят, что они обладают обратной связью; пере-

работка такого рода информации в сигналы, корректирующие деятельность машины или организма, называется в кибернетике контролем, или регулированием.

Под управлением в кибернетике понимают такое воздействие на объект (процесс), которое выбрано из множества возможных воздействий с учетом поставленной цели, состояния объекта (процесса), его характеристик и ведет к улучшению функционирования или развитию данного объекта, т.е. к приближению цели.

Всевозможные частные случаи управления могут быть сведены к нескольким видам. В частности, выделяется разомкнутое и циклическое управление.

Первый вид - управление без обратной связи и, следовательно, без регулирования хода управляемого процесса со стороны управляющей системы.

Второй вид предлагает и то и другое. Это более эффективный способ управления и наиболее характерный для кибернетики.

Циклическое управление, в свою очередь, может осуществляться по-разному:

а) по принципу так называемого «черного ящика», когда обратная связь и, следовательно, регулирование процесса осуществляется только с учетом «выхода» конечного продукта. Путь, ведущий к этому продукту, остается неизвестным;

б) по принципу так называемого «белого (прозрачного) ящика». В этом случае обратная связь несет сведения о пути, которым получен конечный продукт.

Характерным случаем применения понятия «черного ящика» к исследованиям детерминированных объектов является экспериментальное изучение гидродинамики технологических потоков.

При построении математической модели движущихся потоков оказалось необходимым таким методом экспериментально получить выходную величину - реакцию объекта на входное возмущение, которое выбирается исследователем и может быть одним из стандартных сигналов.

При выборе принципа управления необходимо учесть, что между воздействием, оказываемым на объект, и внешней реакцией (конечным продуктом, выходом) нет однозначной связи.

Так, к одному и тому же ответу обучаемого при решении математической задачи могут вести существенно разные виды познавательной деятельности: в одном случае это может быть результатом памяти, в другом - результатом самостоятельного мышления.

Известно, что правильный ответ можно получить даже при ошибочных действиях. Рассмотрим подробнее понятия «информация» и «управление».

2. Информация. Элементы теории информации

Большое значение в кибернетике имеет понятие «количества информации». Это понятие в кибернетике сыграло роль, аналогичную понятию энергии в физике, также дающему возможность с общей точки зрения описать различные физические процессы. За сравнительно короткий срок ученым удалось создать теорию информации, которая позволила количественно характеризовать информацию. Основные положения этой теории изложены в статье «Математическая теория связи», опубликованной в 1948 г. американским ученым К.Э. Шенноном.

В настоящее время *теория информации* - это научная математическая дисциплина, имеющая широкое применение благодаря абстрактной математической форме ее основных положений. Все основные выводы теории информации излагаются в виде теорем и их доказательств.

В этой теории введена универсальная единица измерения *количества информации*, которая называется бит. Смысл этой единицы иллюстрирует простейший случай передачи информации при рассмотрении совокупности двух равновероятных событий. Например, при бросании монеты равновероятно выпадение герба или цифры. До проведения опыта (бросание монеты) предполагаются два равновероятных его исхода. После проведения опыта получают информацию об исходе опыта (выпал герб или выпала цифра). Эта информация и соответствует одному биту.

Итак, в качестве единицы измерения количества информации принимается «бит» - binary digit, - выражающий сигнал возможного появления одного из двух равновероятных событий (да - нет). Понятие информации тесно связано с понятиями вероятности и случайности. Получить информацию - это значит узнать то, что не было известно ранее, узнать больше, чем было известно. Все это можно связать с определенной вероятностью появления тех или иных ожидаемых событий. Количество информации складывается из числа двоичных выборов, равных логарифму числа событий

$$I = \log_2 m, \quad (3.1)$$

где I - количество информации в битах (двоичных единицах);

m - число равновероятных возможных состояний (исходов).

Определение количества информации путем вычисления вероятности появления того или иного состояния процесса характеризует его энтропию, т.е. степень неопределенности и неорганизованности процесса, соответственно информационная энтропия определяется из некоторого множества сообщений. В соответствии с теорией информации К. Шеннона следует, что если сообщение не снимает неопределенности, то оно не содержит необходимой информации. Когда о действии системы мы получаем полную информацию, тогда в ней не остается неопределенности, т.к. количество

информации в ней численно равно энтропии системы. Энтропия, так же как информация о вероятности появления одного (m) возможных значений выражается законом Хартли, определяющем энтропию простого события

$$H = \log_2 m. \quad (3.2)$$

Этот закон определяет, что если вероятность появления всех значений (m) одинакова, то вероятность появления одного из них равна

$$p = 1 / m, \quad (3.3)$$

энтропия которого

$$H = \log_2 (1/p) = \log_2 1 - \log_2 p = 0 - \log_2 p = - \log_2 p. \quad (3.4)$$

Всякое сложное событие, состоящее из ряда простых событий, имеет в « n » раз большую энтропию

$$H = - n \log_2 p. \quad (3.5)$$

Дифференцируя полученную функцию получаем

$$H' = - 1,45 * n * (1/p), \quad (3.6)$$

то есть быстрота изменения исходной функции (энтропии) уменьшается при усложнении события и увеличении числа равновероятных состояний.

Пропускная способность потока информации определяется мерой средней информации, которая может быть передана через него в единицу времени

$$R = (- p \log_2 p) / T \quad (3.7)$$

- функция непрерывная, следовательно, рассматривая среднюю информацию как бесконечно большую величину, приходим к выводу: чем больше информация, тем меньше пропускная способность канала связи.

Чаще всего находит применение незавершенная информация. Динамика потоков информации характеризуется определенной изофункциональностью, т.е. соотношением содержания задач, объема ожидаемой информации и т.д. между собой.

Теория информации позволяет получить ряд важных практических выводов. Например, используя математические выражения, вытекающие из теории информации, можно определить пропускную способность каналов связи, возможные резервы в передаче информации, количество информации сложных объектов, возможность ее хранения и переработки. Такие данные используются при расчетах, проектировании и исследованиях реальных объектов. Эта теория и ее выводы успешно применяются при решении конкретных проблем создания и совершенствования химико-

технологических процессов, агрегатов и аппаратов химической технологии, ЭВМ, телевидения, радио, управления космическими станциями, кораблями и т.д.

3. Объект регулирования

Объектом химической технологии условимся называть типовой технологический процесс, идущий в аппаратуре определенного конструктивного оформления (простой объект), или технологическую цепочку, охватывающую несколько процессов и аппаратов (сложный объект). Объекты химической технологии обычно находятся под влиянием различных факторов (параметров, переменных). При этом воздействие, поступающее на вход объекта, называют входной величиной, или входом, а реакцию на выходе того же объекта - выходной величиной, или выходом. Между этими величинами существует взаимосвязь, которая характеризует протекающий в объекте процесс. Объект обычно подвергается возмущениям, и для их компенсации используют управляющие воздействия.

Всякое устройство (или его часть), на котором производится регулирование, обычно называется объектом регулирования. Например, объектом регулирования может быть сосуд, содержащий жидкость, а регулируемой величиной - высота уровня. Объектами регулирования могут быть также паровой котел, ректификационная колонна и т.д.; регулируемыми величинами - давление, температура, число оборотов, состав и т.д.

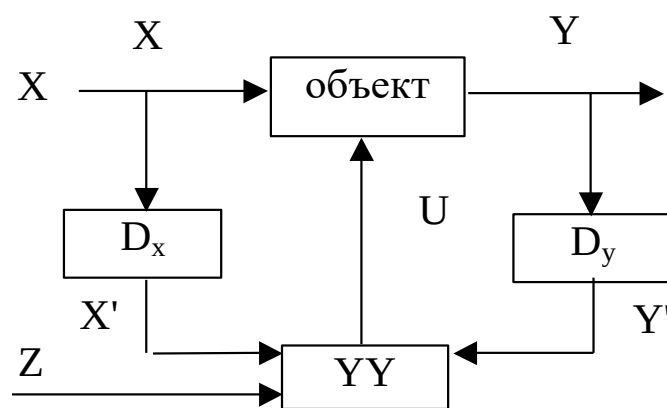


Рис. 3.2. Блок-схема взаимосвязи между параметрами объекта регулирования:
 X - состояние среды, влияющие на состояние объекта;
 Y - состояние объекта; Dx, Dy - датчики, измеряющие состояние среды и состояние объекта;
 YY - управляющее устройство; Z - возмущения

При изучении объекта ищут не любые связи между параметрами, а вполне определенные. Исследователя всегда интересует взаимосвязь меж-

ду входами и выходами, так как именно она характеризует протекающий в объекте процесс. Однако, установление этой связи нередко представляет собой весьма сложную задачу вследствие многофакторности и случайного характера возмущающих воздействий. Взаимосвязь между параметрами может осуществляться по различным каналам. Принято называть: « $x - y$ » - основным каналом связи; « $u - y$ » - каналом управления; « $z - y$ » - каналом возмущения.

Совокупность параметров, которые воздействуют на объект, принято разделять на группы в зависимости от характера и доли их участия в процессе. В самом общем случае объект характеризуют: входные величины (входы) - параметры $x_1, x_2, \dots, x_n$; выходные параметры (выходы) - параметры $y_1, y_2, \dots, y_m$; управляющие воздействия (управления) - параметры $u_1, u_2, \dots, u_k$; возмущающие воздействия (возмущения) - параметры $z_1, z_2, \dots, z_s$.

Входные параметры x_i ($i = 1, 2, \dots, n$). Входными принято называть параметры, значения которых могут быть измерены, но возможность воздействия на них отсутствует. Предполагается также, что эти параметры не зависят от режима процесса. Применительно к химической технологии входными параметрами являются, например, контролируемый состав исходного сырья, теплоносители, поступающие в аппарат, количество и качество которых могут быть определены, но не подлежат изменению (поступающие потоки из предшествующих стадий или исходных емкостей).

Выходные параметры y_i ($i = 1, 2, \dots, m$). Под выходными переменными понимают параметры, величины которых определяются режимом процесса и которые характеризуют его состояние, возникающие в результате суммарного воздействия входных, управляющих и возмущающих параметров.

Поскольку назначение этих параметров описывать состояние процесса, то их иногда называют параметрами состояния, хотя они только характеризуют получаемую продукцию и являются более узким понятием, чем такие характеристики режима процесса, как температура, состав среды и т.п. Параметры y_i относятся к внутренним, так как зависят от режима процесса. Они представляют собой количество и качество выходного продукта или теплоносителя на выходе.

Возмущающие параметры z_i ($i = 1, 2, \dots, s$). Объект всегда подвержен внутренним и внешним возмущениям. Возмущающими называют параметры, значения которых случайным образом изменяются с течением времени и которые недоступны для измерения. Это могут быть, например, различные примеси в исходном сырье, постепенное изменение активности катализатора, изменение температуры процесса за счет реакции, а также возмущения любого иного характера.

Возмущающие воздействия могут, как зависеть от процесса в объекте, так и не зависеть от него и, следовательно, бывают соответственно внутренними и внешними. К числу независимых от процесса возмущений мож-

но отнести неконтролируемые примеси в составе исходной руды (внешние возмущающие воздействия). Зависящими от процесса возмущениями будут, например, изменения активности катализатора (внутренние возмущающие воздействия). В том и другом случаях параметры z_i являются неконтролируемыми возмущающими воздействиями. Интенсивность их действия, точки приложения в системе носят, как правило, случайный характер, и часто неизвестна их природа (старение аппаратуры, изменение слоя накипи, неконтролируемые примеси и т.п.).

Управляющие параметры u_i ($i = 1, 2, \dots, k$). Объект химической технологии должен быть управляемым. Но обычно он подвержен влиянию различных возмущений. В целях компенсации этих возмущений на объект накладываются управляющие воздействия, которые приводят его в устойчивое состояние, требуемое по условиям протекания процесса. Таким образом, управляющими называются параметры, на которые можно оказывать прямое воздействие в соответствии с определенным выбором или предъявляемыми требованиями, что позволяет управлять процессом. Для аппаратов химической технологии управляющими параметрами могут быть: регулируемое количество исходной смеси, подаваемой в аппарат; регулируемые давление в аппарате и температура теплоносителя и т.п. В числе общих свойств входных и управляющих параметров важно то, что они не зависят от процесса, протекающего в объекте, и поэтому относятся к внешним параметрам.

Т а б л и ц а 1.2

Характеристики групп параметров, воздействующих на объект

Название	Обозначение	Характеристика	Примечание
1	2	3	4
Входной параметр	X	Значения X могут быть измерены, но возможность воздействия на них отсутствуют	Параметры не зависят от режима процесса (внешние параметры)
Выходной параметр	Y	Параметры, величины которых определяются режимом процесса и которые характеризуют его состояние, возникающие в результате суммарного воздействия входных, управляющих и возмущающих параметров	Параметры зависят от режима процесса (внутренние параметры)
Возмущающий параметр	Z	Параметры, значения которых случайным образом изменяются с течением времени и которые недоступны для измерения	Могут, как зависеть от процесса в объекте, так и не зависеть от него (внутренние и внешние)

Окончание табл. 1.2

1	2	3	4
Управляющий параметр	U	Параметры, на которые можно оказывать прямое воздействие в соответствии с определенным выбором или предъявляемыми требованиями	Параметры не зависят от режима процесса (внешние параметры)

По соображениям целесообразности ведения технологического процесса на входные, управляющие и выходные параметры обычно накладываются ограничения, определяющие диапазон изменения каждого параметра. Параметры рассмотренных групп, кроме возмущающих, принципиально могут быть количественно оценены (измерены, вычислены), так как их материальная природа известна. Точность определения величин x_i , u_i и y_i зависят только от средств количественной оценки и требований задачи. Возмущающие параметры недоступны для измерения. Они проявляются лишь в том, что изменяют картину влияния входных и управляющих параметров на выходные.

При отсутствии или незначительных возмущениях в объектах можно однозначно определить влияние входных и управляющих параметров на выходные. Если возмущающие воздействия велики и вносят значительные искажения в характер связей в объекте, то даже при известных входных и управляющих параметрах нельзя говорить о точном воздействии входов и управлений на выходы, а лишь о некотором измененном (искаженном) воздействии. Такие возмущения обычно являются случайными. Наличие и степень влияния случайных возмущающих воздействий в объектах определяется сущностью (природой) процессов, протекающих в них. В связи с этим по своей природе все процессы принято разделять на детерминированные и стохастические.

С точки зрения автоматического регулирования в объектах регулирования наибольший интерес представляет динамическая зависимость между входными и выходными величинами. Поэтому вместо входных и выходных величин речь будет идти о входном и выходном сигналах. Выходной величиной объекта регулирования всегда является регулируемая величина. Важнейшей входной величиной объекта регулирования является так называемая управляющая переменная, с помощью которой система приводится в данное состояние. Управляющая переменная одновременно является выходной величиной регулятора. Другими входными величинами объекта регулирования могут быть помехи, которые приводят к нежелательным отклонениям регулируемой величины от заданного значения. Одной из задач регулятора является компенсация действия помехи изменениями управляющих входных величин.

На практике встречается также задача формирования специального

поведения систем, удовлетворяющих определенным требованиям к процессу, которые называются целью.

Предположим, что в момент начала формирования входов процесс в системе не удовлетворяет требованиям. Влиять на поведение системы можно только путем воздействия на входы, поэтому во множестве входов выделим два подмножества X_1 и X_2 . Одно из них называется возмущениями, а другое – управлениями.

Например, входом в реактор идеального смешения являются объемный расход v и концентрация реагента $C_{\text{вх}}$. Допустим, что необходимо обеспечить $C_{\text{вых}} = C_0$. Пусть на концентрацию на входе $C_{\text{вх}}$ влиять нельзя, а на v – можно; тогда v является управлением, а $C_{\text{вх}}$ – возмущением.

Таким образом, мы имеем дело с проблемой управления, то есть с поиском управлений, обеспечивающих достижение заданной цели. Хотя цель налагается на выход, но, используя связь между выходом и состоянием, ее всегда можно представить в виде цели в пространстве состояний. После определения управлений, решаем вопрос устойчивости системы.

Задача устойчивости заключается в ответе на вопрос, будет ли система выполнять свои функции при возникновении возмущений. Пусть назначение системы состоит в преобразовании входа X^0 , порождающего процесс Z^0 , в выход Y^0 . Пусть процесс X в пространстве состояний не совпадает с процессом X^0 : $\bar{Z}(t_0) = Z^0(t_0) + \Delta Z(t_0)$. Процесс Z^0 называется невозмущенным, а процесс Z – возмущенным. Возникает вопрос, сходится ли процесс $\bar{Y}((t_0) = G(t, \bar{Z}(t))$ при $t \succ t_0$ и $t \rightarrow \infty$ к процессу Y^0 .

Как правило, рассматриваются системы с одной регулируемой величиной (параметром). Такие системы называются одномерными. Однако часто встречаются системы, в которых требуется регулировать большее число величин. Такие системы называются двух-, трех- и соответственно многомерными. Если фиксирована произвольная комбинация требуемых значений регулируемых величин, то число управляющих величин регулируемой системы должно быть не меньше числа основных регулируемых величин.

4. Основные этапы управления объектом ХТС

Для синтеза управления управляющему устройству необходимо сообщить цели управления и ресурс управления, в рамках которого возможно изменение объекта.

Управляющее устройство получает на входе информацию об управлении, с помощью которого можно достичь цели, т.е. перевести объект в искомое состояние, соответствующее выполнению заданной цели в рамках ресурса. Рассмотрим этапы такого управления.

1. *Формулировка целей управления* связана с определением критериев и требований к ним, выполнение которых решает задачу управления. Цели, т.е. требования к функционалам имеют тройственный характер: это цели-неравенства, цели-равенства и экстремальные цели. Они выражают потребности субъекта, эксплуатирующего объект управления.

2. *Этап выделения объекта управления из среды* связан с определением «границы», отделяющей объект от окружающей его среды. Эта граница зависит от целей управления и ресурса, выделенного на управление.

3. *Этап структурного синтеза модели объекта управления* связан с определением структуры модели объекта.

Эта модель необходима для синтеза эффективного управления объектом. При управлении сложным объектом эффективность управления прямо зависит от адекватности синтезируемой модели.

4. *Этап идентификации параметров модели объекта управления* связан с определением параметров по наблюдению поведения объекта в режиме нормальной эксплуатации, т.е. при отсутствии управления.

5. *Этап планирования экспериментов с объектом* связан с определением параметров модели в режиме специально организованных экспериментов. При этом определяется область W допустимого изменения варьируемого входа и критерий эффективности эксперимента, который задается на дисперсной матрице D искомых коэффициентов $C = (C_1, \dots, C_q)$. Под планом U эксперимента подразумевается набор входов $U = \langle U_1, \dots, U_N \rangle$, которые следует реализовать в эксперименте, чтобы по полученным наблюдениям выхода объекта оценить искомые параметры C . Для определения оптимального плана U^* необходимо решить задачу оптимизации:

$$K(U, S) \rightarrow \underset{U \subset \Omega}{\text{extr}} \rightarrow U^* \quad (3.8)$$

где K - критерий эффективности плана, заданный на плане и структуре модели S .

Теория оптимальных планов такого рода экспериментов разработана для объектов сравнительно простой, чаще всего для полиномиальной структуры.

Три последних этапа управления связаны с синтезом модели объекта управления. Такая модель позволяет построить оптимальное управление.

6. *Этап синтеза оптимального управления.* Заключается в определении управления U^* , реализация которого в объекте дает возможность добиться заданной цели управления, если модель объекта верна.

7. *Этап реализации управления* связан с «введением» полученного на предыдущем этапе управления в объект. Эта процедура не представляет принципиальных трудностей при управлении техническими системами.

По окончании процесса реализации управления объект переходит в

новое состояние Y , которое, как правило, отличается от искомого Y^* , т.к. ввиду сложности объекта управления действуют следующие факторы:

- приближенность модели F ;
- «зашумленность» информации о состоянии среды X' и объекта Y' , получаемой YU , приводит к искажению синтезированной модели F даже в случае, если ее структура в точности соответствует структуре объекта F_0 ;
- дрейф характеристик объекта приводит к тому, что модель F всегда отстает от модели F_0 и даже в принципе не может быть адекватной ей. Этот дрейф может быть вызван предыдущими шагами управления.

Таков простейший цикл управления, который применяют для простых объектов. Сложные объекты управления, изменяющиеся во времени, требуют введения этапа коррекции.

8. *Этап коррекции* призван откорректировать систему управления в связи с изменением свойств объекта. Эта коррекция может затронуть параметры модели, структуру объекта, цели управления Z^* .

Сказанное означает, что применительно к ХТС заслуживает рассмотрения циклическое управление, осуществляемое по принципу «белого (прозрачного) ящика».

Осуществление такого управления возможно при выполнении определенной системы требований, предъявляемых кибернетикой.

Прежде всего, необходимо обеспечить следующие моменты:

- а) указать цель управления;
- б) установить исходное состояние управляемого процесса;
- в) определить программу воздействия, предусматривающую основные переходные состояния процесса;
- г) получение информации по определенной системе параметров о состоянии управляемого процесса, т.е. обеспечить систематическую обратную связь;
- д) обеспечить переработку информации, полученной по каналу обратной связи, выработку корректирующих (регулирующих) воздействий и их реализацию.

Выполнение этих общих требований невозможно без знания специфических закономерностей процесса, которым мы управляем.

Пример. Алгоритм этапов управления системы ХК 1 контура (коррозия) двухконтурных АЭС.

Первый контур включает в себя реактор типа ВВЭР и циркуляционные петли охлаждения. Каждая петля содержит главный циркуляционный насос (ГЦН), парогенератор и две главные запорные задвижки (ГЗЗ). К одной из циркуляционных петель первого контура подсоединен компенсатор давления, с помощью которого в контуре поддерживается заданное давле-

ние воды, являющейся в реакторе одновременно и теплоносителем и замедлителем нейтронов. На энергоблоках с реактором ВВЭР-440 имеется по 6 циркуляционных петель, на энергоблоке с реактором ВВЭР-1000 – 4 циркуляционные петли.

Водно-химический режим первого контура должен обеспечивать выполнение следующих функциональных требований:

- подавление радиолиза водного теплоносителя в поле ионизирующего излучения работающего на мощности реактора;
- мягкое регулирование реактивности активной зоны реактора в течение топливных компаний за счет борной кислоты;
- минимальную интенсивность процессов коррозии конструкционных материалов и минимальную скорость роста отложений на теплопередающих поверхностях первого контура;
- минимальную интенсивность накопления и миграции радиоактивных продуктов.

Кроме того, равновесная концентрация аммиака в теплоносителе первого контура должна поддерживаться на уровне, обеспечивающем содержание водорода в пределах 2,7 - 8,4 мг/дм³. Все растворы, вводимые в контур без предварительной деаэрации и имеющие концентрацию кислорода более 0,02 мг/дм, дозируются гидразингидратом, концентрация которого в этом растворе должна в два-три раза превышать концентрацию кислорода.

Системы очистки теплоносителя и подпиточной воды должны работать непрерывно при наличии циркуляции теплоносителя. Отключение фильтров систем очистки допускается на время регенерации или замены фильтрующего материала.

При концентрации железа в теплоносителе не более 0,05 мг/дм³ контроль за содержанием хрома и никеля может не проводиться. Если концентрация железа в теплоносителе превышает 0,05 мг/дм³, необходимо проводить химический контроль за содержанием хрома и никеля и принимать меры к поиску и устранению причин увеличения концентрации продуктов коррозии.

Требования к объему химического контроля. Объем и периодичность химического контроля должны обеспечивать надежную информацию о состоянии технологических сред и систем первого контура.

Технологическая схема первого контура с аммиачно-калиевым ВХР с борным регулированием представлена на рис. 3.3.

Для контроля качества теплоносителя и технологических сред вспомогательных систем первого контура предусмотрены следующие точки отбора проб:

- точка 1 - после доохладителя продувки теплоносителя I контура;
- точка 1,а - за активной зоной реактора;
- точка 2 - за подпиточными насосами для контроля качества под-

питочной воды и воды, подаваемой для уплотнения валов главных циркуляционных насосов.

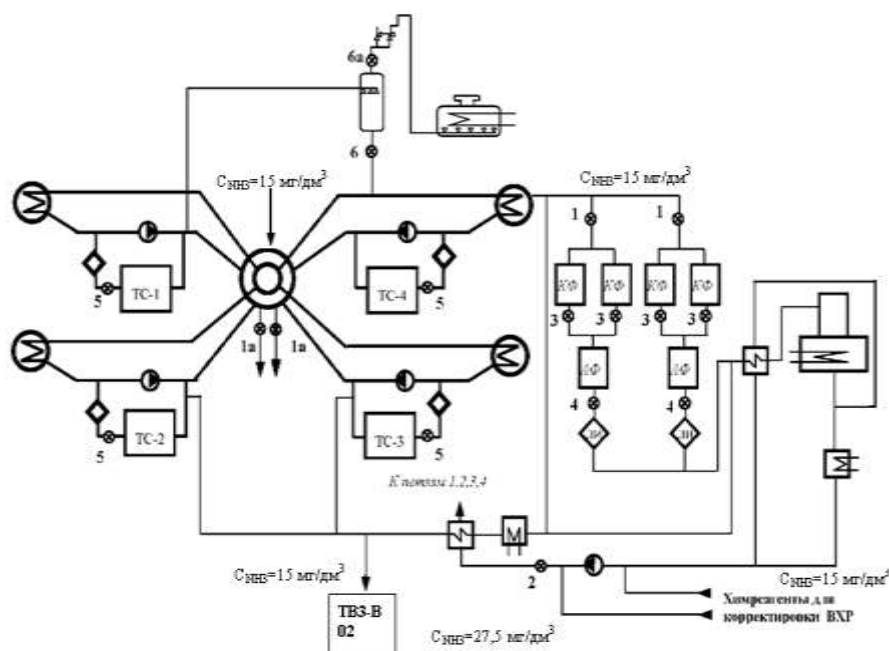


Рис. 3.3. Технологическая схема первого контура с аммиачно-калиевым ВХР с борным регулированием

В целях поддержания водно-химического режима первого контура следует производить анализы проб в следующих точках вспомогательных систем и установок:

- точка 3 - за катионитными фильтрами установки 2 очистки подпиточной воды для контроля за работой этих фильтров;
- точка 4 - за анионитными фильтрами установки 2 очистки подпиточной воды для контроля за работой этой установки;
- точка 5 — за высокотемпературными (титановая крошка) фильтрами;
- точка 6 - водная и паровая среда компенсатора давления.

Методы и средства химического контроля технологических сред приведены в табл. 1.3.

При нарушении ВХР первого контура по концентрации водорода в точке 6 производится контроль концентрации борной кислоты, концентрации аммиака, концентрации водорода, в точке 6а - контроль концентрации водорода и кислорода. При дозировке гидразингидрата производится контроль концентрации гидразингидрата в точке 2.

Т а б л и ц а 1.3

**Минимальный необходимый объем и периодичность химического контроля
качества теплоносителя и подпиточной воды при работе реактора на мощности**

Наимено- вание по- казаний	Методы контроля	Средства измерений	Чувстви- тельность метода
1	2	3	4
Величина рН	Потенциометрический	Автоматические или ла- бораторные рН-метры: рН-121, рН-673, ЭВ-74, И-130	0,05 единиц
Борная кислота	Нейтронно-абсорбционный; объемный метод (алкалимет- рическое титрование)	Барометр НАРБ-10 Автоматический титратор АТ Ручное титрование	30 мг/дм ³
Сумма ионов щелочных металлов	Пламяфотометрический	Пламяфотометры: ПАЖ-2, ПФМ, ФПА	Натрий-0,005, мг/дм ³ Калий-0,01, мг/дм ³ Литий-0,01, мг/дм
Аммиак	Фотоколориметрический с реактивом Несслера	Фотоэлектроколоримет- ры: КФК-2, КФК-3	0,5 мг/дм ³
Водород	Хроматографический	Газовые хроматографы: ЛХМ-80, "Поиск-2"	0,09 мг/дм ³
Кислород	Визуально-олориметрический с метиленовым голубым	Визуальное сравнение со стандартной шкалой	0,005 мг/дм ³
Хлорид- ионы	Нефелометрический; фотоко- лориметрический с азотно- кислым серебром	Нефелометр Фотоэлектроколоримет- ры: КФК-2, КФК-3	0,04 мг/дм ³
Фторид- ионы	Потенциометрический с ионоселективным электродом	рН-метры: ЭВ-74, И-130	0,01 мг/дм ³
Железо	Фотоколориметрический с ортофенаттролином или сульфосалициловый	Фотоэлектроколоримет- ры: КФК-2, КФК-3	0,01 мг/дм ³
Медь	Фотоколориметрический с купризном, с индикатором ПАР	Фотоэлектроколоримет- ры: КФК-2, КФК-3	0,004 мг/дм ³
Нефте- продукты	Флуоресцентный; фотоколо- риметрический с экстракцией гексаном и озолением	Флуорометр ЭФ-3МА Фотоэлектроколоримет- ры: КФК-2, КФК-3	0,10 мг/дм ³
Гидразин	Фотоколориметрический с парадиметиламино- бензальдегидом	Фотоэлектроколоримет- ры: КФК-2, КФК-3	0,01 мг/дм ³

Окончание табл. 1.3

1	2	3	4
Кремниевая кислота	Фотоколориметрический с молибденом аммония	Фотоэлектроколориметры: КФК-2, КФК-3	0,01 мг/дм ³
Никель	Фотоколориметрический с диметилглиоксином	Фотоэлектроколориметры: КФК-2, КФК-3	0,01 мг/дм ³
Хром	Фотоколориметрический с дифинилкарбозитом	Фотоэлектроколориметры: КФК-2, КФК-3	0,005 мг/дм ³
Прозрачность	Определение светопропускания воды нефелометрическим методом	Нефелометр; Фотоэлектроколориметры: КФК-2, КФК-3 при длине волны 440 нм в кюветах с длиной рабочей грани, равной 50 мм	0,5 %

При водообменах в первом контуре производится контроль концентрации борной кислоты в точке 6. Анализ фторид-ионов выполняется в течение первых 1000 ч работы реактора после перегрузки активной зоны.

Контроль качества теплоносителя при стоянке реактора при перегрузке топлива и ремонта оборудования проводится один раз в сутки по всем нормируемым показателям, за исключением концентрации борной кислоты. Контроль концентрации борной кислоты производится один раз в смену.

Качество раствора в гидроемкостях системы аварийного охлаждения воды, в баках аварийного запаса борной кислоты и в баках концентрированного раствора борной кислоты должно контролироваться один раз в месяц. При наличии автоматического борометра показания его должны регистрироваться не реже одного раза в месяц, а при его отсутствии определение концентрации борной кислоты выполнять один раз в неделю.

Для проведения химического контроля должны применяться аттестованные методы и средства контроля.

При выходе реактора на мощность и при работе в нестационарных режимах периодичность и объем химического контроля определяются в соответствии с требованиями оперативных указаний.

В воде компенсатора давления один раз в неделю контролируют концентрацию кислорода, калия и борной кислоты; в случае значительного изменения какого-либо из этих показателей осуществляют также контроль концентрации водорода, хлоридов, фторидов и pH.

В фильтрате ионообменных фильтров системы очистки реакторной воды один раз в неделю контролируют концентрации хлоридов и фторидов. Резервуар хранения борной кислоты подвергают контролю на хлориды и фториды перед вводом в действие.

Одним из важных элементов первого контура - бассейн выдержки от-

работанных твэлов. В воде бассейна выдержки содержание борной кислоты контролируют один раз в месяц; рН, концентрацию хлоридов и фторидов, жесткость, г-активность (после дегазации в течение 15 мин) - один раз в неделю. Так как воду бассейна выдержки подвергают обессоливанию, требуется контроль эффективности этого процесса. рН, содержание борной кислоты, хлоридов, фторидов, г-активность определяют как при отклонении от норм качества воды бассейна выдержки, так и воды за системой очистки. Естественно, что объектом химического контроля служит также добавочная вода первого контура.

Наиболее жестко нормируемые для реакторной воды загрязнения - кислород, хлориды и фториды. Для них разрешается лишь кратковременное превышение допустимых концентраций.

На основе приведенной выше информации формализуем задачу минимизации коррозионных разрушений 1 к ВВЭР. Для этого определим «информацию», которой мы можем располагать, и структурируем этапы управления.

Т а б л и ц а 1.4

**Модельный пример реализации этапов управления
для управления процессом минимизации коррозионных разрушений**

№	Информация	Относительная (внешняя)	Структурная
1	2	3	4
	Содержание: кислорода; железа; хрома; никеля	Содержание кислорода	Содержание: кислорода; железа; хрома; никеля
	Управление		
1	Формулировка целей управления	Минимизация интенсивности процессов коррозии конструкционных материалов и скорости роста отложений на теплопередающих поверхностях I контура	$O_2 \leq 0,02 \text{ мг} / \text{дм}^3$ $Fe^{3+} \leq 0,05 \text{ мг} / \text{дм}^3$ хром никель
2	Этап выделения объекта управления из среды	На схеме определяем объект по точкам контроля	Алгоритм регулирования
3	Этап структурного синтеза модели объекта управления	Структура модели - полиномиальная	$y = a + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3$ а – константа; у - содержание кислорода; x ₁ - содержание железа; x ₂ - содержание хрома; x ₃ - содержание никеля

Окончание табл. 1.4

1	2	3	4
4	Этап идентификации параметров модели объекта управления	Расчет параметров модели методами математической статистики	Например, $y = 0,4 + 15x_1 + 57x_2 + 0,03x_3$
5	Этап планирования экспериментов с объектом	Специально организованный эксперимент не проводится	
6	Этап синтеза оптимального управления	Синтез не проводится, т.к. рассматривали 1 управляющий параметр	
7	Этап реализации управления	Проверка на объекте разработанной модели	
8	Этап коррекции	Возможен пересчет параметров модели при изменении свойств объекта, либо разработка другой структуры модели	

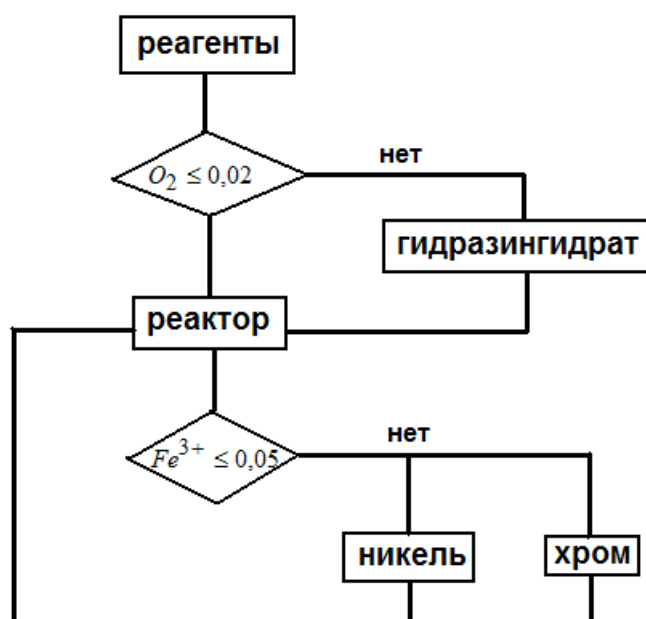


Рис. 3.4. Алгоритм регулирования

Итак, кибернетика утверждает единство законов управления. Различают разомкнутое и циклическое управление. Одним из основных понятий кибернетики является информация - структурная и относительная. В качестве единицы измерения информации принимается 1 бит.

Для анализа работы системы и выявления количественных зависимостей между выходными величинами и параметрами входа и возмущения строят математические модели, которые базируются на информации об объекте с последующими рекомендациями по управлению объектом.

Совокупность параметров, которые воздействуют на объект, принято разделять на группы в зависимости от характера и доли их участия в процессе. В самом общем случае объект характеризуют: входные величины (входы) - параметры $x_1, x_2, \dots, x_n$; выходные параметры (выходы) - параметры $y_1, y_2, \dots, y_m$; управляющие воздействия (управления) - параметры $u_1, u_2, \dots, u_k$; возмущающие воздействия (возмущения) - параметры $z_1, z_2, \dots, z_s$.

Основные этапы управления объектом.

1. Формулировка целей управления.
2. Этап выделения объекта управления из среды.
3. Этап структурного синтеза модели объекта управления.
4. Этап идентификации параметров модели объекта управления.
5. Этап планирования экспериментов с объектом.
6. Этап синтеза оптимального управления.
7. Этап реализации управления.
8. Этап коррекции.

Везде, где это технологически целесообразно, следует работать на устойчивых режимах. Однако во многих случаях наиболее выгодными оказываются неустойчивые режимы. Иллюстрирующим примером являются процессы мягкого окисления органических веществ, где на нижнем устойчивом режиме скорость реакции крайне мала, а на верхнем устойчивом - велик выход нежелательных продуктов. Таким образом, подобные процессы следует проводить с принудительным регулированием на среднем неустойчивом температурном режиме для получения максимального выхода ценных продуктов.

Методы кибернетики применимы к любой системе. В последнее время они успешно реализуются в химии и химической технологии при решении первостепенно важной задачи - оптимизации химико-технологических процессов, т.е. нахождения наивыгоднейших условий их проведения. С этой целью обычно составляется математическая модель объекта химической технологии, и применяются соответствующие математические методы и средства кибернетики - ЭВМ. Не менее важная задача заключается в автоматизации и управлении сложными химическими системами. Для автоматического поддержания заданного режима работы аппарата необходимо, прежде всего, знать, какова устойчивость этого режима.

В химической кибернетике сформировано два направления, которые определяют исходные позиции при составлении математических моделей химико-технологических процессов.

Первое направление основано на принципе «черного ящика» и может быть использовано при отсутствии или весьма ограниченном объеме теоретических сведений о моделируемом объекте, когда неизвестен даже ориентировочный вид соотношений, описывающих его свойства. Уравнения математического описания в этом случае представляют собой систему эм-

пирических зависимостей, полученных в результате статистического исследования действующего объекта. Такие модели называются статистическими и имеют вид корреляционных и регрессионных соотношений, характеризующих связь между входными и выходными параметрами объекта. В зависимости от способа сбора исходного статистического материала различают пассивный и активный эксперимент.

Второе направление в химической кибернетике, определяющее исходные позиции при составлении математического описания, базируется на изучении физической сущности и анализе механизма процесса, наличии сведений о физической природе моделируемого объекта и известных основных теоретических закономерностях протекающего в нем процесса.

При этом в состав математического описания вводятся зависимости, связывающие параметры, характеризующие изучаемый объект, в единую систему уравнений. Среди таких соотношений могут быть выражения, отражающие фундаментальные законы сохранения вещества и энергии, уравнения, описывающие физические и химические («элементарные») процессы, протекающие в моделируемой системе. Кроме того, в состав математического описания могут входить различные эмпирические и полумэмпирические зависимости между некоторыми параметрами, теоретическая форма которых неизвестна или слишком сложна, а также ограничения на переменные параметры процесса.

В отличие от статистических, математические модели, которые составляются, исходя из предпосылок второго направления, качественно более правильно характеризуют моделируемый объект даже при наличии недостаточно точных в количественном отношении параметров модели. С помощью этих моделей можно изучать общие свойства объектов моделирования, относящихся к определенному классу. Но составление таких моделей требует по сравнению со статистическими больших затрат времени и средств.

Вопросы самоконтроля

1. Что понимают под кибернетикой?
2. Что понимают под информацией?
3. Как различают виды информации?
4. Что понимают в кибернетике под связью?
5. Что понимают в кибернетике под обратной связью?
6. Что понимают в кибернетике под контролем или регулированием?
7. Что понимают в кибернетике под управлением?
8. Какие выделяют виды управления?
9. Что представляет собой разомкнутое управление?
10. Что представляет собой циклическое управление и как осуществляется?

11. Что принимают в теории информации в качестве единицы измерения?
12. Что характеризует определение количества информации путем вычисления вероятности появления того или иного состояния процесса?
13. Как связана энтропия с усложнением события и увеличением числа равновероятных состояний?
14. Как определяется пропускная способность потока информации?
15. Чем характеризуется динамика потоков информации?
16. Что представляет собой объект регулирования?
17. Как разделяют совокупность параметров, воздействующих на объект, в зависимости от характера и доли их участия в процессе?
18. Что представляют собой входные параметры?
19. Что представляют собой управляющие параметры?
20. Что представляют собой возмущающие параметры?
21. Что представляют собой выходные параметры?
22. Основные этапы управления.
23. Какие факторы отличают искомое состояние Y^* от состояния Y ?
24. Какой этап управления вводится для управления сложными объектами?

Литература

1. Бельков В.П. Математические модели химико-технологических процессов / В.П. Бельков, В.В. Шестопапов, В.В. Кафаров. - Ч.2. - М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева, 1981. - 40 с.
2. Большая Советская Энциклопедия
<http://bse.sci-lib.com/article060914.html>
3. Бондарь А.Г. Математическое моделирование в химической технологии / А.Г. Бондарь. – Киев, Вища школа, 1973. – 280 с.
4. Гордеев Л.С. Математическое моделирование химико-технологических систем / Л.С. Гордеев, Е.С. Кадосова, В.В. Марков, Ю.В. Сбоева. - М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 1999. – Ч.1. Методологические и теоретические основы: Текст лекций. – 48 с.
5. Кафаров В.В. Математическое моделирование основных процессов химических производств / В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. – М.: Высшая школа. – 1991. – 389 с.
6. Маликов И.Т. Вычислительные методы и применение ЭВМ / И.Т. Маликов, Р.В. Кветный. – К.: Вища школа, 1989. – 216 с.
7. Федорова С.А. Методические указания по математическому моделированию и применению ЭВМ в химической технологии для студентов заочной формы обучения / С.А. Федорова. - Севастополь: СНИЯЭиП, 2003. – 68 с.
8. Фрэнк Р. Математическое моделирование в химической технологии / Р. Фрэнк. – М.: Химия, 1971. – 272 с.
9. Чермак И. Динамика регулируемых систем в теплоэнергетике и химии / И. Чермак, В. Петерка, И. Заворка. – М.: Мир, 1972. – 623 с.

Л е к ц и я № 4

УРАВНЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

1. Типы математических моделей

Все многообразие математических уравнений, образующих математические модели, можно разделить на две группы:

- 1) алгебраические уравнения;
- 2) интегро-дифференциальные уравнения.

Уравнения первой группы называют также *конечными уравнениями*. Эти уравнения описывают аппараты (объекты) с сосредоточенными параметрами в стационарном режиме. В общем виде система уравнений с сосредоточенными параметрами записывается следующим образом:

$$Y_i = f_i(X, U), \quad (4.1)$$

где Y_i - выходные переменные объекта системы;

$X = (X_1 - X_m)$ - вектор (набор) входных переменных объекта или системы;

$U = (U_1 - U_i)$ - вектор сосредоточенных управлений объекта или системы;

f_i - вид функциональной зависимости, которая связывает выходные переменные Y_i с вектором входных X и вектором управляемых переменных U ;

i - номер переменной или уравнения математической модели в системе; i меняется от одного до n , что в дальнейшем будем записывать сокращенно: i .

Уравнения первой группы используются при составлении тепловых и материальных балансов, в которых не учитываются изменения количества тепла, и вещества как функция от времени или пространственных координат. Примерами алгебраических уравнений являются уравнения модели реактора идеального смешения в стационарном режиме.

Уравнения второй группы содержат в своем составе производные от переменных процесса, причем различают системы обыкновенных дифференциальных уравнений и системы уравнений в частных производных.

Уравнения в обыкновенных производных описывают объекты (системы) с параметрами, разделенными либо во времени, либо по одной из пространственных координат (например, длине). Запись такого типа уравнений в общем виде представляется следующим образом:

$$\frac{dz}{dl} = \varphi_i(Z, U, W), \quad 0 \leq l \leq \bar{l}, \quad i. \quad (4.2)$$

где $Z = (Z_1 \dots Z_n)$ - вектор распределенных по координате l переменных;

$W = (W_1 \dots W_s)$ - вектор, распределенных по координате l управлений.

Если производные в уравнении взяты по различным переменным, то такое уравнение называется уравнением в частных производных. Уравнения в частных производных описывают объекты (системы) с распределенными параметрами, в которых распределение осуществляется по нескольким координатам (например, пространство - время). Примером систем, описываемых уравнениями в частных производных, является система с распределенными параметрами, работающая в квазистатическом режиме (медленно меняющемся режиме).

$$\frac{\partial z_i}{\partial l} = \varphi_i(Z, Q, U, W), \quad i = 1...n \quad 0 \leq l \leq \bar{l} \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial Q_j}{\partial t} = \varphi_j(Z, Q, U, W), \quad 0 \leq t \leq \bar{t} \quad j = 1...m \quad (4.4)$$

где t - время (астрономическое);

l - пространственная координата (длина);

$Q = (Q_1...Q_m)$ - вектор переменных состояния оборудования.

Все рассуждения о системе уравнений любого вида в равной мере относятся и к единичным уравнениям, так как последний случай является частным случаем системы, в которой число уравнений равно единице.

Прежде чем приступить к решению системы уравнений, необходимо определить число неизвестных и число независимых уравнений. К независимым относят те уравнения, которые не являются линейной комбинацией других уравнений системы. Например, в системе уравнений

$$x + y + 3z = 5; \quad (4.5)$$

$$3x + y + 3z = 3; \quad (4.6)$$

$$2x + y + 3z = 4 \quad (4.7)$$

третье уравнение записанной системы может быть получено из двух предыдущих их сложением и делением на два. Таким образом, рассматриваемая система содержит три неизвестных (x, y, z) и имеет два независимых уравнения. Следовательно, эти уравнения нельзя однозначно решить относительно x, y, z . Сказанное выше также относится и к системам дифференциальных уравнений.

Если число независимых уравнений меньше числа неизвестных и если существует хотя бы одно решение системы, то для этой системы существует бесконечное множество решений. В этом случае интересующее нас решение может быть найдено с учетом дополнительно сформулированных условий или исходя из физического смысла рассматриваемой задачи.

Когда уравнений в системе больше, чем неизвестных, то при нахож-

дении решения системы уравнений желательно использовать все имеющиеся уравнения, что приведет к уменьшению числа ошибок, которые возникают при составлении уравнений. Последнее замечание относится ко всем типам уравнений.

2. Граничные условия

Для получения конкретных решений дифференциальных уравнений, необходимо задать граничные условия. Задать граничные условия - задать значения зависимых переменных для различных значений независимых переменных. Чаще всего в качестве независимых переменных при моделировании химико-технологических процессов выступают время и координата пространства, а в качестве зависимых - температура, давление, концентрация и другие физико-химических показатели процесса, распределение которых в пространстве и времени рассматриваются. Когда значения зависимых переменных задаются на краях рассматриваемого интервала независимой переменной, то граничные условия называют *краевыми условиями*.

Если значения зависимых переменных задаются для начального значения независимой переменной, то они называются *начальными условиями*.

При решении уравнений математической модели имеющей в своем составе дифференциальные уравнения, необходимо задавать граничные условия для тех зависимых переменных, производные которых входят в модель. Пусть, например, модель представлена уравнениями

$$\frac{dx}{dl} = x^3 + y^2 + 5z; \quad (4.8)$$

$$\frac{dy}{dl} = z + 3y - x; \quad (4.9)$$

$$z = 4x - y + 7. \quad (4.10)$$

Для решения системы записанных уравнений необходимо задать частные значения x , y для частного значения независимой переменной l . Число граничных условий определяется порядком дифференциального уравнения. Так, для решения предложенного уравнения требуется задать значения l_0 и dl/dt при $t = 0$ как начальные условия. Краевые условия для уравнений с распределенными параметрами могут быть двух типов:

- простые краевые условия;
- сложные краевые условия.

Простые краевые условия характеризуются краевыми условиями, которые определены в явном виде

$$Z_i(0) = X_i \quad Z_i(\bar{l}) = Y_i \quad (4.11)$$

Эта запись означает, что значение распределенной переменной с номером i при $l = 0$ равно входной переменной x с номером i , а значение этой же распределенной переменной Z_i при конечном значении координаты распределения $l = \bar{l}$ равно значению переменной Y_i на выходе объекта (системы). Сложные краевые условия характеризуются краевыми соотношениями, записанными в неявной форме

$$F_i[Z(0), Z(\bar{l}), x, y] = 0. \quad (4.12)$$

Сложные краевые условия задают $Z(0)$ и $Z(l)$ лишь в виде функций от векторов входных X и выходных Y переменных, которые необходимо определять решением системы краевых соотношений, указанных выше.

При разработке математических моделей помимо граничных условий, как правило, используют различные допущения.

Допущения – явления, которыми мы пренебрегаем при построении математической модели.

Корректность допущений, как и выбора цели, критериев, задач, параметров процесса, метода решения, проверяется адекватностью математической модели. Под адекватность математической модели понимаем ее способность отображать выходные переменные технологического объекта с относительной погрешностью не более некоторого заданного значения d .

В общем смысле под адекватностью математической модели понимают правильное качественное и достаточно точное количественное описание именно тех характеристик технологического объекта, которые наиболее важны в данном конкретном случае.

Полученная модель должна быть точной, экономичной, робастной и продуктивной.

Точность математической модели дает возможность обеспечить приемлемое совпадение реальных и найденных при помощи математической модели значений выходных переменных технологического объекта, составляющих вектор $Y = (y_1, y_2, \dots, y_n) \in$.

Пусть y_i^M и y_i^P найденное при помощи математической модели и реальное значение выходной переменной. Тогда относительная погрешность математической модели по отношению к этой переменной будет равна

$$\varepsilon_i = (y_i^M - y_i^P) / y_i^P, \quad i = \overline{1, n}. \quad (4.13)$$

В качестве скалярной оценки вектора $\varepsilon = (\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n)^T \in R^n$ можно принять какую-либо его норму, например,

$$\varepsilon = \sqrt{\sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2} \quad \text{или} \quad \varepsilon = \max_{i=1, n} |\varepsilon_i| \quad (4.14)$$

Экономичность математической модели оценивают затратами на вычислительные ресурсы (машинное время и память), необходимые для проведения вычислительного эксперимента с математической моделью на ЭВМ. Эти затраты зависят от числа арифметических операций при использовании модели, от размерности и пространства фазовых переменных, характеризующих состояние технологического объекта, и других факторов.

Очевидно, что требования экономичности, высокой точности и адекватности математической модели противоречивы и на практике могут быть удовлетворены лишь на основе разумного компромисса.

Робастность математической модели характеризует ее устойчивость по отношению к погрешностям исходных данных, способность нивелировать эти погрешности и не допускать их чрезмерного влияния на результат вычислительного эксперимента.

Продуктивность математической модели связана с возможностью располагать достаточно достоверными исходными данными. Если они являются результатом измерений, то точность их измерения должна быть не ниже, чем для тех переменных, которые получаются при использовании математической модели. В противном случае математическая модель будет непродуктивной и ее применение для анализа конкретного технологического объекта теряет смысл.

В зависимости от масштаба технологической системы и наших предположений о его свойствах математические модели принимают конкретный вид.

Можно говорить о математической модели технологической машины или аппарата, технологического процесса, производства, предприятия и даже целой отрасли. Эти математические модели отличаются одна от другой полнотой учета и глубиной описания различных процессов в системе, а также размерностями векторов y , x , a , o и вектор-функций F , их связи $F(y, x, a, o) = 0$.

Различие допущений, как и самих математических моделей, обуславливается их предназначением, например, для исследования эффективности режимов функционирования технологических объектов; оптимизации установившихся (статических) и переходных (динамических) режимов их работы; оптимального проектирования технологических объектов и управления ими и т.п.

При построении моделей технологических объектов обычно вводят ограничения, представляющие собой устанавливаемые пределы изменения значений переменных или ограничивающие условия распределения и расходования тех или иных ресурсов (энергии, материалов, запасов сырья, времени и т.п.). Они могут вводиться либо разработчиком (искусственные ограничения), либо самой системой вследствие присущих ей свойств (естественные ограничения).

Ограничения на переменные системы

На переменные системы могут быть наложены ограничения. В общем случае ограничения могут иметь *форму равенств и неравенств*. Ограничения на переменные ограничивают область допустимых значений переменных или устанавливают дополнительные зависимости между ними. Различают *жесткие и нежесткие ограничения*.

Жесткие ограничения устанавливают верхние или нижние пределы для переменных. Жесткие ограничения нельзя нарушать. К жестким ограничениям относятся, прежде всего, ограничения по безопасности, или ограничения на переменные, значения которых за пределами ограничений не имеет смысла. Жесткие ограничения могут быть представлены неравенствами

$$x_i \geq x_{i,n} \quad x_i \leq x_{i,v}, \quad (4.15)$$

где $x_{i,n}$ - нижний предел значения для i -й переменной;

$x_{i,v}$ - верхний предел ограничения для i -й переменной.

Нежесткие ограничения можно нарушать, но качество процесса при этом быстро ухудшается, когда предел ограничения превышает значительно. Например, изменение целевой функции путем добавления к целевой функции возможного «штрафа» в виде

$$Ш = K_i \left(\frac{x_i}{x_{i,v}} \right)^{M_i}, \quad (4.16)$$

где K_i - положительная константа;

M_i - большое по величине положительное целое число;

$x_{i,v}$ - величина нежесткого ограничения переменной.

Используют и другие функции возможного «штрафа». При введении функции штрафа в задачах максимизации изменений целевой функцией будет разность ($R - Ш$), а в задачах минимизации будет соответственно сумма ($R + Ш$), где R - исходная целевая функция.

3. Пространственно-временная классификация процессов и моделей химической технологии

В зависимости от конкретной реализации процесса и его аппаратного оформления все многообразие химико-технологических процессов можно разделить на четыре класса исходя из временного и пространственного признаков:

- процессы, переменные во времени (нестационарные);
- процессы, не меняющиеся во времени (стационарные);

- процессы, в ходе которых их параметры изменяются в пространстве;
- процессы без пространственного изменения параметров.

Так как математические модели являются отражением соответствующих объектов, то для них характерны те же классы, а именно:

- модели, неизменные во времени, - статические модели;
- модели, переменные во времени, - динамические модели;
- модели, неизменные в пространстве, - модели с сосредоточенными параметрами;
- модели, изменяющиеся в пространстве, - модели с распределенными параметрами.

Рассмотрим перечисленные классы моделей.

Статические модели. Статические модели отражают работу объекта в стационарных условиях, т.е. когда параметры процесса не меняются во времени. Иначе говоря, если конечное изменение входной величины линейной системы после затухания переходного процесса приводит к конечному изменению выходной величины, система называется статической.

Если при постоянной входной величине устанавливается постоянная скорость изменения выходной величины, т.е. выходная величина равномерно изменяется во времени, убывая или возрастая с постоянной скоростью (теоретически неограниченной, практически же это изменение ограничено нелинейностями, которые всегда имеют место при больших отклонениях), то такая система называется *астатической*.

Математическое описание в статических моделях не включает время как переменную и состоит из алгебраических уравнений либо дифференциальных уравнений в случае объектов с распределенными параметрами.

Примером объекта, описываемого статической моделью, служит аппарат полного смешения объемов V в установившемся режиме работы, в который непрерывно подаются реагенты А и В в количествах v_A , v_B ($v_A + v_B = v$) и отводится продукт реакции Р.

Математическое описание аппарата включает следующие уравнения материального баланса (для простоты тепловой баланс не рассматривается):

$$v(C_{A0} - C_A) = V k C_A C_B; \quad (4.17)$$

$$v(C_{B0} - C_B) = V k C_A C_B \quad (4.18)$$

Здесь k - константа скорости реакции.

Статическая модель реактора может быть представлена системой алгебраических уравнений вида

$$\begin{cases} r + \frac{v}{V} C = \\ r - k C = \end{cases} \quad (4.19)$$

Первое уравнение выражает материальный баланс в стационарном состоянии, второе – закон действующих масс.

Динамические модели. Динамическая модель отражает изменение объекта во времени. Математическое описание таких моделей обязательно включает производную во времени. Иначе говоря, динамической характеристикой объекта принято называть уравнения, устанавливающие зависимость изменения во времени выходной величины от вариации входных возмущающих параметров.

Часто динамическую модель объекта строят в виде передаточных функций, связывающих входные и выходные переменные (представление динамических моделей в виде передаточных функций особенно удобно для целей управления объектом). Примером динамической модели может служить модель рассмотренного выше аппарата полного смешения, но работающего в неустановившемся режиме. В этом случае математическое описание аппарата включает следующие уравнения материального баланса:

$$\begin{cases} \frac{dC_A}{dt} = -\left(C_{A0} - \frac{v}{V}C_A\right) - kC_AC_B & C_A = C_{A0} \text{ при } t = 0 \\ \frac{dC_B}{dt} = -\left(C_{B0} - \frac{v}{V}C_B\right) - kC_AC_B & C_B = C_{B0} \text{ при } t = 0 \end{cases} \quad (4.20)$$

В зависимости от того, какой порядок имеет обыкновенное дифференциальное уравнение, описывающее динамическую зависимость между входной и выходной величинами, говорят о системах первого, второго, ..., n-го порядка.

Динамическая модель реактора идеального смешения может быть представлена в виде

$$\begin{cases} \frac{dC(t)}{dt} + \frac{v}{V}C(t) + r(t) = \frac{v}{V}C_{\text{вх}}(t) & C(0) \\ r(t) - kC(t) = 0 \end{cases}, \quad (4.21)$$

где C_0 – концентрация реагента А в реакторе в момент времени $t = 0$;

$C(t)$ – текущая концентрация реагента А в момент времени t ;

$C_{\text{вх}}(t)$ – концентрация реагента А на входе в реактор;

$r(t)$ – скорость реакции;

k – константа скорости реакции;

V – объем реактора;

v – объемный расход;

t – время.

Система уравнений (4.21) – это совместная система, состоящая из неоднородного дифференциального уравнения материального баланса и алгебраического уравнения закона действующих масс. Состояние и выход реактора характеризуются вектором $Z(t) = Y(t) = \{C(t), r(t)\}$, а вход – величиной $C_{\text{вх}}(t)$.

Реактор периодического действия представляет собой замкнутую си-

стему, у которой отсутствуют вход и выход. Модель реактора имеет вид совместной системы, состоящей из однородного дифференциального уравнения материального баланса и алгебраического уравнения закона действующих масс.

$$\begin{cases} \frac{\partial C(t)}{\partial t} + r(t) = 0 & C(t) \\ r(t) - kC(t) = 0 \end{cases} \quad (4.22)$$

Состояние реактора характеризуется вектором, $Z_{(t)} = \{C(t), r(t)\}$, начальное состояние Z_0 – вектором $Z_0 = \{C_0, r_0\}$.

При анализе динамических характеристик систем в целях автоматического управления, происходящие в системе процессы изучают с точки зрения распространения и передачи информации. Целью такого анализа является построение математической модели, которая достаточно точно описывала бы преобразования сигнала - при прохождении его через исследуемую систему.

Динамические характеристики регулируемых систем могут определяться двумя способами: либо идентифицировать системы по результатам экспериментов с использованием входных и выходных воздействий; либо искать необходимую математическую модель системы расчетным путем, используя общие физические законы, сведения о конструкции и технологических параметрах оборудования.

Системы, динамические характеристики которых можно описать обыкновенными дифференциальными уравнениями, называются системами с сосредоточенными параметрами.

Наряду с системами с сосредоточенными параметрами рассматриваются системы с распределенными параметрами, или непрерывные системы. Они описываются дифференциальными уравнениями в частных производных.

Модели с сосредоточенными параметрами. Для данного класса моделей характерно постоянство переменных в пространстве. Математическое описание включает алгебраические уравнения либо дифференциальные уравнения первого порядка для нестационарных процессов. Примером объекта, описываемого данным классом моделей, может служить аппарат с идеальным (полным) перемешиванием потока (РИС). Скорость мешалки такова, что концентрация во всех точках аппарата одинакова (рис. 4.1.).

Модели с распределенными параметрами. Если основные переменные процесса изменяются как во времени, так и в пространстве, или если указанные изменения происходят только в пространстве, то модели, описывающие такие процессы, называются моделями с распределенными параметрами.

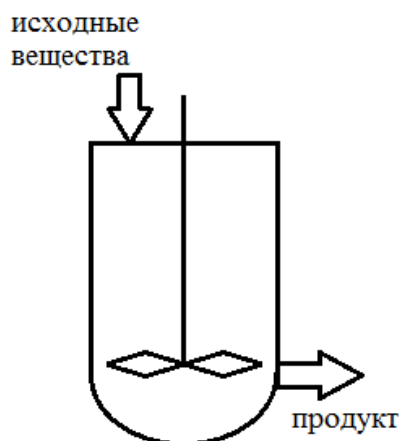


Рис. 4.1. Пример схемы аппарата, реализующего модель с сосредоточенными параметрами (РИС)

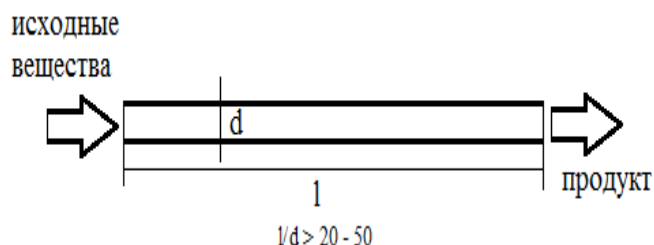


Рис. 4.2. Пример схемы аппарата, реализующего модель с распределенными параметрами (РИВ)

Их математическое описание включает обычно дифференциальные уравнения в частных производных, либо обыкновенные дифференциальные уравнения в случае стационарных процессов с одной пространственной переменной. Примером процесса, описываемого такими моделями, служит трубчатый аппарат с большим отношением длины к диаметру и значительной скоростью движения реагентов (РИВ) (рис. 4.2.)

Модели с распределенными параметрами могут быть статическими и динамическими. Динамическая модель трубчатого реактора идеального вытеснения имеет вид

$$\begin{cases} \frac{\partial C(t,l)}{\partial t} + w \frac{\partial C(t,l)}{\partial l} + r(t,l) = 0 \\ r(t,l) - kC(t,l) = 0 \end{cases}, \quad (4.23)$$

где w – линейная скорость, при начальном условии $C(0,l) = C_0(l)$ и граничном условии $C(t,0) = C_{\text{вх}}(t)$.

Условие $C_0(l)$ характеризует начальное состояние реактора, а $C_{\text{вх}}(t)$ – вход. Состояние реактора есть функция $C(t, l)$, а выход $C(L)$, где L – длина трубчатого реактора.

Статическая модель реактора идеального вытеснения имеет вид

$$\begin{cases} \frac{dC(l)}{dl} + r(l) = 0 & C(0) \\ r(l) - kC(l) = 0 \end{cases}. \quad (4.24)$$

Кроме аналитического метода описания химико-технологического процесса, удобно использовать топологические графы. Они позволяют структурировать технологическую схему, упростить процесс в части составления математического описания.

4. Графы. Использование графов в химической технологии

Первые задачи теории графов были связаны с решением математических развлекательных задач и головоломок – задача о кёнигсбергских мостах (задача Эйлера: на реке, протекающей через город Кенигсберг и омывающей два острова, имеется 7 мостов. Может ли пешеход обойти все мосты, пройдя по каждому из них только один раз, и вернуться в исходную точку).

Многие результаты сер. 19 в., относящиеся к теории графов были получены при решении практических проблем. Так Г. Киргоф при составлении полной системы уравнений для токов и напряжений в эклектической схеме предложил, по существу, представлять такую схему графом и находить в нем деревья, с помощью которых выделяют линейно независимые системы контуров. А. Кэли, исходя из задач подсчета числа изомеров предельных углеводородов, пришел к задачам перечисления и подсчета деревьев, обладающих заданными свойствами, и решил некоторые из них. В 20-м веке задачи, связанные с графами, начали возникать не только в физике, электротехнике, химии, биологии, экономике, социологии и т.д., но и внутри математики, в таких ее разделах, как алгебра, топология, теория вероятностей, теория чисел и др. Методы этих разделов стали успешно использоваться для решения задач теории графов. Наряду с термином «граф» в начале 20 в., употреблялись в качестве синонимов и другие термины, например, карта, комплекс, диаграмма, сеть, лабиринт.

Теория графов: основные понятия и определения

Графом называется некоторое множество $U = (u_1, u_2, \dots, u_n)$ состоящее из пар элементов (x_i, x_j) некоторого конечного множества $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, элементы которого называются вершинами.

Существует 2 случая построения графа:

- когда безразлично, в каком порядке берутся вершины при образовании из них пар; в этом случае пара (x_i, x_j) называется ребром, соединяющим вершины;
- когда существенно в каком порядке выбираются вершины, тогда пара (x_i, x_j) называется дугой.

Пара множеств $G = (X, U)$ называется конечным графом, если присутствует первый случай, во втором случае пара $(X, \tilde{U})$ конечным ориентированным графом, или орграфом.

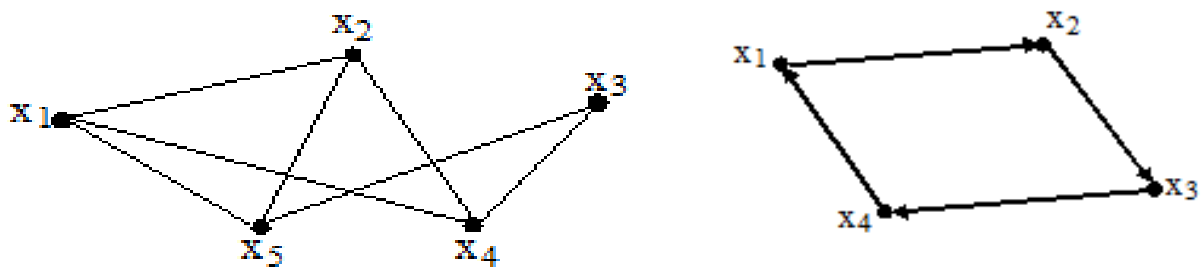


Рис. 4.3. Построение графов

Граф называется симметрическим, если для любых двух вершин x_i и x_j из того, что x_i принадлежит подмножеству Tx_j , следует, что x_j принадлежит Tx_i . Если эти условия удовлетворяются не для всех пар точек графа, то граф называется асимметрическим.

Граф G_0 , который состоит из изолированных вершин, не соединенных ребрами, называют *нуль-графом*. Если начальная и конечная точки совпадают, образуется *контур*.

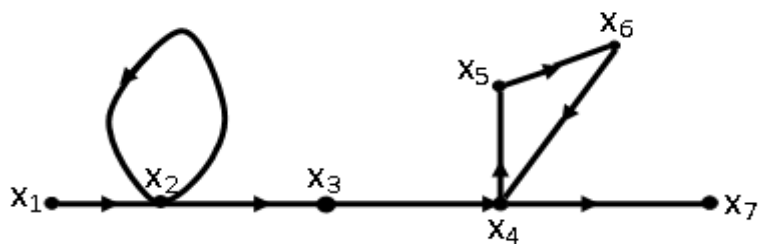


Рис. 4.4. Путь, контур, петля орграфа

Петлём называется контур единичной длины; петля связывает точку саму с собой.

Деревом графа G называется связный граф T , содержащий все вершины графа G , но не имеющий циклов. Ребра (дуги) графа, входящие в дерево, называются ветвями, а ребра (дуги), входящие в дополнение дерева, хордами. Дерево, все ветви которого имеют вершину, называют иногда лагранжевым деревом. Несвязанный граф имеет несколько деревьев - по числу связанных компонентов. Совокупность деревьев несвязанного графа называют *лесом* F графа. Доказано, что любой связный граф имеет дерево.

Если анализируемый граф не является деревом, то он содержит, по меньшей мере, один цикл. При удалении ребра из этого цикла оставшаяся часть либо становится деревом, либо содержит какой-нибудь другой цикл. Процесс удаления ребер можно осуществлять до тех пор, когда подграф не окажется деревом.

Представление графов с помощью матриц. Информация, содержащаяся в некотором графе, может быть представлена в алгебраическом виде посредством матриц.

Эта связь графа и матрицы имеет чрезвычайно важное значение при практическом применении топологических методов к математическому описанию ХТС, так как позволяет перевести структурные особенности системы на язык чисел, фигурирующих в математических уравнениях.

Матрицей смежности [H], соответствующей некоторому графу $G = (X, Y)$, который состоит из n вершин X_i ($i = 1, 2, \dots, n$), называется матрица [H] порядка $(n \times n)$ с элементами $h_{ij} = 0$, если вершина x_i не связана дугой с вершиной x_j , $h_{ij} = 1$, если вершина связана дугой с вершиной x_j .

При составлении матрицы смежностей для неориентированного графа учитывается связь вершины и ребра.

Матрица [H] графа имеет следующий вид:

$$[H] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

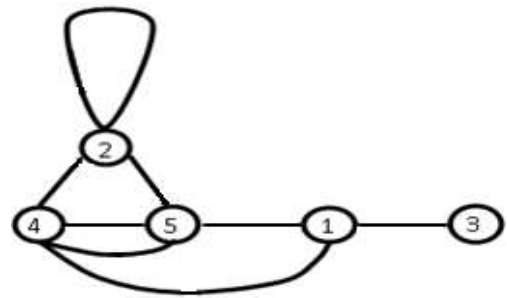


Рис. 4.5. Неориентированный граф для [H]

При составлении матрицы смежностей для ориентированного графа учитывается связь только той вершины, из которой выходит дуга.

Матрица [H] графа имеет следующий вид:

$$[H] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

Диагональный элемент $h_{22} = 1$, что соответствует наличию петли при вершине 2.

Матрицей инцидентий, которая соответствует некоторому графу $G = (k, q)$, состоящему из n вершин k_i ($i = 1, 2, \dots, n$) и из дуг q_j ($j = 1, 2, \dots, m$), называется матрица [S] порядка $(n \times m)$ с элементами

$s_{ij} = -1$, если дуга q_j выходит из вершины k_i ;

$s_{ij} = +1$, если дуга q_j входит в вершину k_i ;

$s_{ij} = 0$, если дуга q_j не инцидентна вершине k_i .

Матрицу [S] называют также структурной матрицей графа.

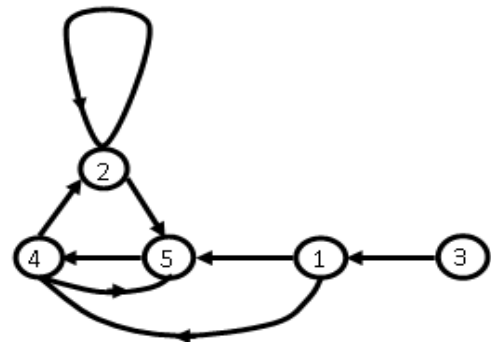


Рис. 4.6 Граф для [H]

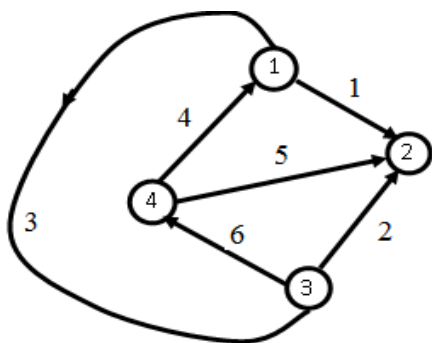


Рис. 4.7. Граф для [S]

Для графа, изображенного на рис. 4.7 имеем матрицу

$$S = \begin{bmatrix} -1 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (4.26)$$

Любой определитель, содержащийся в матрице инцидентий [S], равен нулю, +1 или -1.

Матрицы используются при составлении уравнений, которые решают с помощью вычислительных методов.

На выходе в химической технологии для материальных потоков чаще всего получают линейные системы уравнений.

Характеристика и принципы построения топологических моделей (графов) ХТС

Потоковые графы. Каждой ХТС можно поставить в соответствие потоковый граф, гомоморфный рассматриваемой системе и являющийся некоторой топологической моделью одного типа обобщенных или физических потоков данной системы. Потоковые графы строят для установившегося технологического режима ХТС.

Существуют три типа потоковых графов ХТС: материальные, тепловые (энергетические) и параметрические.

Материальные потоковые графы (МПГ). Эти графы подразделяют на графы по общему массовому расходу физических потоков и графы по массовому расходу некоторого химического компонента.

Вершины МПГ по общему массовому расходу физических потоков (МПГО) соответствуют элементам ХТС, которые трансформируют общие массовые расходы физических потоков, источникам и стокам веществ физических потоков.

Вершины МПГ по массовому расходу некоторого химического компонента соответствуют элементам ХТС, трансформирующим массовые расходы химического компонента, внешним и внутренним источникам, а также стокам этого компонента в системе.

Тепловые потоковые графы (ТПГ). Вершины ТПГ соответствуют элементам системы, которые изменяют расходы тепла физических потоков, внешним и внутренним источникам и стокам тепла ХТС.

Основные характерные особенности материальных потоковых графов по общему массовому расходу физических потоков и тепловых потоковых графов ХТС.

1. Ориентированность, так как движение потоков веществ и энергии в системе происходит в строго определенном направлении.

2. Асимметричность, потому что не все соседние элементы связаны между собой обратными технологическими потоками.

3. Связность, так как все элементы в системе взаимосвязаны единой цепью потоков веществ или энергии.

Характерные особенности МПГ по массовому расходу некоторого химического компонента в основном совпадают с особенностями МПГО и ТПГ (ориентированность и асимметричность). Отличие состоит в том, что эти графы могут быть как связными, так и несвязными. Несвязность МПГ по компонентам обусловлена тем, что образование, химическая убыль или целевое выделение данного химического компонента происходят лишь в некоторых элементах ХТС при наличии необходимых технологических условий.

Циклическим потоковым графом называют граф, полученный из материального или теплового потокового графа ХТС путем объединения всех вершин-стоков в одну общую (нулевую) вершину.

Параметрические потоковые графы (ППГ). Такой граф является топологической моделью, отображающей преобразование элементами системы параметров физических потоков ХТС. Вершины ППГ отвечают элементам, представляющим собой технологические операторы, которые качественно или количественно преобразуют параметры физических потоков, а также источникам и стокам физических потоков ХТС.

Пример материального потокового графа по общим массовым расходам технологических потоков ХТС производства этилового спирта.

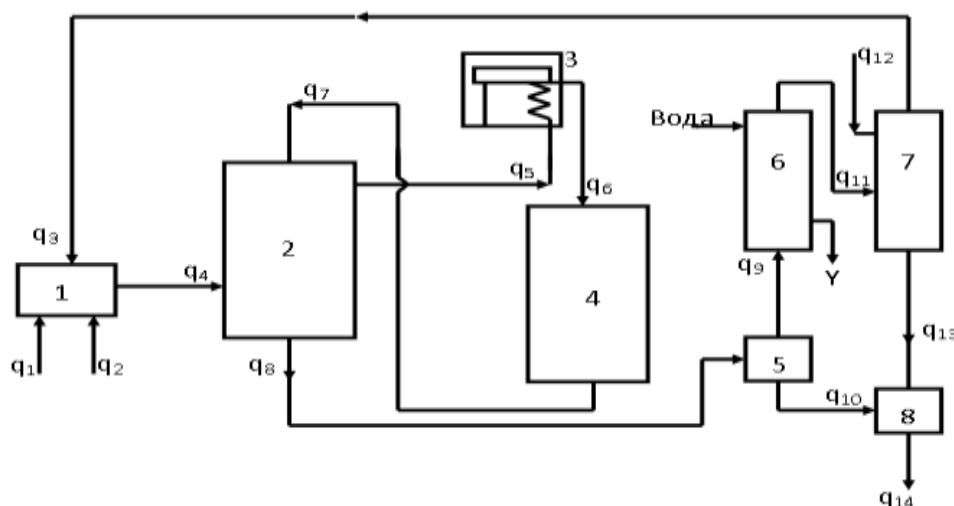


Рис. 4.8. Схема технологических потоков ХТС производства этилового спирта:

- 1 - смеситель; 2 - трубчатый теплообменник; 3 - трубчатая печь;
4 - реактор; 5 - сборник-сепаратор; 6 - холодильник; 7 - абсорбер;
8 - сборник; $q_1 - q_{14}$ - технологические потоки

МПП по общим массовым расходам потоков производства этилового спирта имеет число вершин $m = 3$, $n = 1$, $k = 9$ (так как теплообменнику 2 соответствуют две вершины графа 2' и 2'', что обусловлено двумя независимыми материальными потоками через теплообменник $q_4 = q_5$, $q_7 = q_8$).

1. Изучить физико-химическую сущность технологических процессов ХТС и построить ее операторную схему.
2. Составить таблицу источников и стоков ХТС.

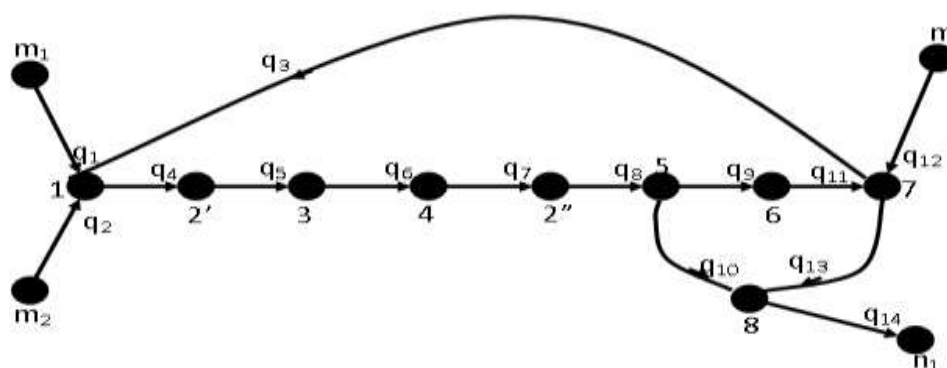


Рис. 4.9. Граф технологических потоков ХТС производства этилового спирта

Матрица графа.

$$H = \begin{matrix} & m & m_1 & m_2 & 1 & 2' & 3 & 4 & 2'' & 5 & 6 & 7 & 8 & n_1 \\ \begin{matrix} m \\ m_1 \\ m_2 \\ 1 \\ 2' \\ 3 \\ 4 \\ 2'' \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \\ n_1 \end{matrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (4.27)$$

В работах Кафарова В.В. с сотрудниками предлагается строить потоковые графы, для которых известны технологическая топология и цель функционирования системы по следующему сценарию.

3. Составить матрицу $[K]$ покомпонентного состава физических потоков системы. Общий элемент такой матрицы 1, если j -й химический компонент входит в состав i -го физического потока $k_{ij} = 0$, в противном случае причем $i = 1 - n$ — число физических потоков ХТС; $j = 1 - m$ — число химических компонентов системы.

4. Составить таблицы одного типа материальных и тепловых обобщенных потоков системы.
5. Составить таблицы соответствия элементов, источников и стоков системы вершинам ее потокового графа.
6. Составить таблицы соответствия одного типа обобщенных потоков и физических ХТС дугам ее потоковых графов.
7. Графически изобразить потоковые графы ХТС.

5. Структурный анализ при расчете ХТС

В процессе анализа ХТС возникает необходимость решать задачи расчета материальных и тепловых балансов ХТС в условиях установившегося технологического режима. Основная цель таких расчетов - определение параметров состояния физических потоков: общих и покомпонентных расходов, составов и температур потоков. Все методы по определению параметров состояния потоков ХТС делятся на два класса: интегральные и декомпозиционные. При использовании интегральных методов выполняется объединение системы уравнений, описывающих работу каждого элемента ХТС, в одну общую систему уравнений. Так как современные ХТС включают в себя значительное количество элементов, то полученная система имеет обычно большую размерность, вследствие чего не всегда удается решить ее на ЭВМ. Кроме того, для каждой ХТС составляется своя общая система уравнений, что приводит к невозможности использования некоторой единой программы для решения системы уравнений различных ХТС. В отличие от интегральных, декомпозиционные методы позволяют свести расчет всей ХТС к последовательности расчета отдельных ее элементов. Размерность системы уравнений для каждого элемента обычно невелика. При использовании декомпозиционных методов появляется возможность автоматизировать процесс расчета ХТС. Это обусловлено тем, что для каждого типа элементов можно составить подпрограмму, а затем из этих подпрограмм компоновать общую программу расчета конкретной ХТС.

Сравнение особенностей интегрального и декомпозиционного методов расчета ХТС представлены в табл. 1.5.

Таблица 1.5

**Сравнительные характеристики интегрального
и декомпозиционного методов расчета ХТС**

<i>Интегральный метод</i>	<i>Декомпозиционный метод</i>
<i>Способ представления задачи</i>	
Глобальная система уравнений	Отдельные моделирующие блоки, стыкующиеся с помощью координирующей программы

Окончание табл. 1.5

<i>Интегральный метод</i>	<i>Декомпозиционный метод</i>
<i>Способ решения задачи</i>	
Совместное решение уравнений	Последовательный расчет с использованием итерационного метода расчета, и, с предварительным анализом ХТС для выявления оптимальной последовательности расчета ХТС.
<i>Достоинства</i>	
Возможность проведения расчета для любого набора неизвестных переменных	Меньшее количество вычислений, наглядность
<i>Недостатки</i>	
Большая размерность единой системы уравнений наряду с отсутствием надежных методов решения смешанных систем линейных, нелинейных и дифференциальных уравнений большой размерности. Уникальность каждой системы уравнений.	Трудность построения оптимального алгоритма расчета ХТС.
<i>Рекомендации</i>	
Применять только при расчетах упрощенных ХТС	Применять для расчета ХТС произвольной сложности

Перед расчетом ХТС декомпозиционными методами необходимо определить порядок расчета элементов ХТС. Для разомкнутой ХТС порядок расчета элементов совпадает с направлением технологических потоков от ввода сырья к выводу продуктов и полупродуктов. Для замкнутой ХТС такая последовательность расчета невозможна, так как переменные состояния обратных технологических потоков не известны. В связи с этим один из способов расчета замкнутой ХТС основывается на разрыве технологических потоков, в результате которого исходная схема превращается в соответствующую разомкнутую. Для обеспечения соответствия между режимом в замкнутой схеме и режимом в разомкнутой схеме необходимо, чтобы для каждого «разорванного потока вектор переменных состояния после точки разрыва был равен вектору переменных состояния до точки разрыва. Чтобы провести замкнутую схему к разомкнутому виду, целесообразно выбирать для разрыва те потоки, которые разрывают одновременно несколько контуров, т.е. для этой задачи можно говорить об оптимальном количестве разрываемых потоков. В связи с вышеизложенным возникает задача анализа структуры ХТС, решение которой сводится к выполнению следующих этапов:

- определение комплексов в рассматриваемой ХТС;
- определение предварительной последовательности расчета комплексов;

- определение оптимального множества разрываемых потоков в каждом комплексе;
- определение окончательной последовательности расчета элементов ХТС.

Современные ХТС отличаются значительной сложностью структуры, многомерностью, взаимным влиянием элементов. Чтобы разрешить задачи анализа, синтеза, оптимизации ХТС, структуру ХТС представляют путем привлечения теории графов. При этом применяются различные виды графов; наиболее часто - ориентированные графы, вершины которых соответствуют элементам, а дуги - обобщенным потокам рассматриваемой ХТС. Представленную в графе информацию можно отобразить при помощи различных матриц, каждая из которых характеризует определенные свойства графа. При решении задач структурного анализа используются различные виды матричного представления одного и того же графа.

Рассмотрим методику выполнения четырех этапов решения задач анализа структуры ХТС.

Этап 1. Выделение комплексов. Комплекс - это часть графа, каждая из вершин и дуг которого, входит в один из контуров графа; помимо этого, если вершина входит в комплекс, то в этот комплекс входят также все вершины, входящие в контуры, которые содержат эту вершину. Для выделения комплексов структуру графа представляют в виде матрицы путей $P = \{p_{ij}\}$, в которой число строк и столбцов равно числу вершин графа, а каждый элемент p_{ij} определяется из условия

$$p_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если существует путь из } i - \text{той вершины в } j \\ 0, & \text{если такого пути не существует} \end{cases} \quad (4.28)$$

При записи элементов в матрице путей считается, что всегда существует путь единичной длины, т.е., например, из вершины 1 можно попасть в вершину 1. На основании матрицы путей составляется вспомогательная матрица S с числом строк и столбцов, равным количеству вершин графа. Элементы этой матрицы рассчитываются исходя из следующего правила:

$$s_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } p_{ij} = p_{ji} = 1; \\ 0, & \text{если } p_{ij} = 0 \text{ или } p_{ji} = 0 \end{cases} \quad (4.29)$$

По данным матрицы можно определить количество комплексов в рассматриваемой ХТС и номера вершин, которые входят в каждый комплекс. В комплекс входят те вершины, которые имеют одинаковую информацию в строках вспомогательной матрицы S . Можно формализовать процесс получения матрицы для выделения комплексов. В основе этого способа лежит преобразование матрицы связей (смежностей) A , в которой количество строк и столбцов равно количеству вершин графа, а каждый элемент удовлетворяет условию: $a_{ij} = 1$, если в графе имеется дуга от i -й вершины к

j -й; $a_{ij} = 0$, если такая дуга отсутствует. Если матрицу связей последовательно возводить в степень $2, 3, \dots, n$, то элемент $a_{ij} \neq 0$ n -й степени матрицы показывает связь i -й и j -й вершин графа через n дуг. Сложив затем логически все возведенные в степень матрицы, получается рассмотренная ранее матрица путей. На основании матрицы путей рассчитываются элементы вспомогательной матрицы S , иначе называемой матрицей выделения комплексов. Если элемент $S_{ij} = 1$, то между вершинами i и j существует как прямой, так и обратный путь и, следовательно, эти вершины входят в один и тот же контур; если $S_{ij} = 0$, то отсутствует либо прямой, либо обратный путь, и, следовательно, эти вершины не входят в контур. Комплекс может включать как несколько вершин, так и одну вершину. В последнем случае комплекс называется вырожденным.

Этап 2. Определение предварительной последовательности расчета ХТС. Этот этап выполняется после выделения комплексов. Совокупность вершин, входящих в комплекс, объединяется в одну общую вершину. В результате такого преобразования получается новый граф, не содержащий контуров. Этот граф соответствует разомкнутой ХТС.

Этап 3. Определение оптимального множества разрываемых дуг. Этот этап разделяется на два подэтапа. На первом подэтапе определяются все контуры, входящие в состав ХТС, на втором - отыскиваются дуги, разрыв которых приведет к разрыву всех контуров.

Один из способов выделения контуров в комплексе заключается в разработке A - таблицы связей для этого комплекса и построении на ее основе прадерева комплекса. A - таблица связей состоит из двух столбцов. В левом столбце проставляются номера вершин, входящих в рассматриваемый комплекс, а в правом столбце - номера вершин этого комплекса, с которыми связана конкретная вершина. Прадеревом комплекса с корнем i называется такое изображение всех путей, существующих в комплексе, когда в каждую вершину, отличную от i , входит только одна дуга. В вершину i ни одна дуга не входит. Построение прадерева начинается в первой вершине комплекса. Построение пути в прадереве продолжается до тех пор, пока не встретится повторная вершина. В этом случае построение соответствующего пути заканчивается, а полученная вершина называется висячей вершиной прадерева. Очевидно, что каждая вершина прадерева принадлежит контуру графа. Общее количество висячих вершин прадерева больше числа контуров, так как разные висячие вершины прадерева могут соответствовать одному и тому же контуру. Все одинаковые контуры, кроме одного, вычеркиваются из списка контуров. Для определения оптимального множества дуг, разрывающих все контуры, строится матрица контуров L , строки которой соответствуют контурам, а столбцы - дугам, входящим в эти контуры. Каждый элемент матрицы контуров L определяется по следующему правилу:

$$l_{ij} \begin{cases} 1, \text{если дуга } j \text{ входит в контур } i \\ 0, \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (4.30)$$

Для определения оптимального множества разрываемых дуг целесообразно дополнить матрицу контуров строкой контурных степеней дуг и столбцом рангов контуров, получив тем самым расширенную матрицу контуров. Ранг контуров r равен числу дуг, входящих в контур. Контурная степень дуги f равна числу контуров, в которые входит данная дуга. При реализации данного подэтапа возможны два случая:

- 1) когда параметричность всех дуг одинакова (рис. 4.10);
- 2) когда параметричность дуг различна (рис. 4.11).

При равной параметричности дуг в расширенной матрице контуров определяется дуга p_j , имеющая максимальную контурную степень. Разрыв этой дуги приведет к разрыву всех контуров, в которых содержится эта дуга. Контурная степень дуги p_j сравнивается с контурной степенью остальных дуг. Если $f_j = f_k$ и дуга p_k входит в те же контуры, что и дуга p_j , тогда дуга p_k геометрически содержится в дуге p_j , является избыточной и ее можно не рассматривать. Если $f_j > f_k$ и дуга p_k входит только в контуры графа, которые включают дугу p_j , то дуга p_k геометрически содержится в дуге p_j и является избыточной. Если после определения и удаления избыточных дуг и разрыва оставшихся комплексы не превращаются в разомкнутую схему, то составляется новая расширенная матрица контуров, получающаяся из старой с учетом удаления избыточных дуг.

При различной параметричности потоков оптимальное множество на q разрываемых дуг должно удовлетворять критерию

$$\sum_{j=1}^q \pi_j \rightarrow \min, \quad (4.31)$$

где π_j - параметричность j -й дуги.

Для определения таких дуг используется матрица контуров, дополненная столбцом рангов контуров и строками контурных степеней и параметричности. В отличие от предыдущего случая, если параметричности дуг f_j и f_k равны и дуга p_j входит в те же контуры, что и дуга p_k , тогда из рассмотрения исключается та дуга, параметричность которой минимальна. Если некоторый столбец p_k или набор m таких столбцов является линейно

зависимым по отношению к столбцу p_1 и $\pi_k \leq \pi_1$ или $\sum_{i=1}^m \pi_i \leq \pi_1$ столбец p_k

или набор из m столбцов называется строго содержащим столбец p_1 . В этом случае дуга, соответствующая столбцу p_1 , является избыточной и ее можно удалить из матрицы контуров. На рис. 4.10 представлена блок-схема алгоритма определения оптимального множества разрываемых дуг при различной параметричности потоков.

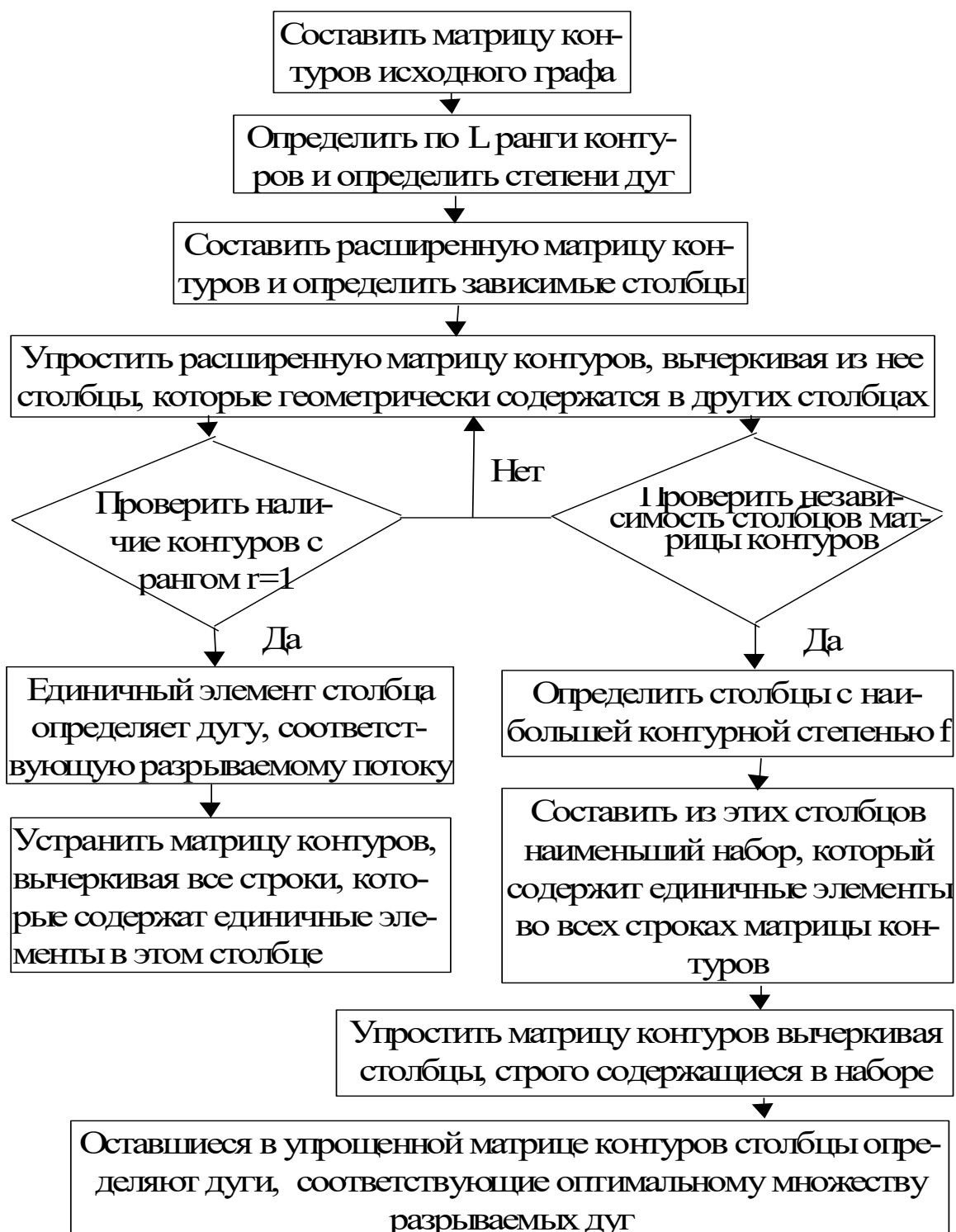


Рис. 4.10. Блок-схема алгоритма определения оптимального множества разрываемых дуг при равной параметричности технологических контуров



Рис. 4.11. Блок-схема алгоритма определения оптимального множества разрываемых дуг при различной параметричности потоков

Этап 4. Определение окончательной последовательности расчета ХТС. Этот этап заключается в определении последовательности расчета элементов ХТС с учетом ранее разработанного графа предварительной последовательности расчета (см. этап 2). Для каждого комплекса следует определить, в каком порядке нужно рассчитывать его вершины, т.е. элементы ХТС. Рассчитать элемент ХТС - это значит определить параметры

входных и выходных потоков при заданных значениях параметров входных потоков. Считается, что известны зависимости, связывающие выходные переменные с входными. В местах разрывов в графе (в структурной схеме ХТС) вводят так называемые итерационные блоки, которые выполняют следующие функции:

- задание начальных значений интегрируемых переменных;
- проверка сходимости всех переменных в точке разрыва (количество таких переменных определяется параметричностью потока);
- перезадание значений переменных в точках разрыва.

В практике расчета ХТС обычно итерационным блокам отводят последние две функции. Кроме того, известно, что если обеспечивается сходимость температур в точках разрыва, то будет обеспечена сходимость по концентрациям, расходам, давлению и другим параметрам потоков.

Анализ и синтез ХТС

Обычно ХТС состоит из нескольких технологических аппаратов, связанных между собой материальными потоками. Поэтому задача анализа системы всегда предполагает, что задана ее структура, т.е. определены все материальные потоки.

Возможны различные варианты задачи анализа систем. Например, могут быть известны значения только некоторых входов и некоторых выходов, а требуется определить значения остальных входов и выходов.

Процедурой, обратной анализу, является синтез. Синтез ХТС – это процедура определения отображений F , G по известным входам $X(t)$ и выходам $Y(t)$.

Таким образом, предполагается, что в процессе синтеза необходимо определить структуры ХТС (структурный синтез), размеры, производительность, значения конструктивных параметров аппаратов и режимных параметров технологических процессов, которые обеспечили бы такое функционирование синтезированной системы, которое при заданных входах гарантировало бы заданные выходы (параметрический анализ). Очевидно, что задача синтеза может иметь множество решений. Часто предлагается найти одно из них, наилучшее в некотором смысле. Процедура поиска наилучшего варианта синтезируемой системы называется задачей оптимизации. Анализ и синтез ХТС включают ряд задач, основными из которых являются идентификация, представление, оптимизация.

Идентификация систем состоит в построении отображений F , G по известным входам или по начальному состоянию. Результатом идентификации является множество состояний системы Z , структура модели (структурная идентификация) и значение ее коэффициентов (параметрическая идентификация).

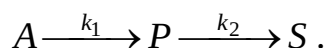
Представление – это исследование возможных способов функционирования системы, то есть вида отображений F, G или при заданных входах, выходах и начальном состоянии Z_0 (для открытых систем) или начальном состоянии замкнутых систем.

В этом смысле представление есть расширение задачи идентификации, так как предполагается, что у способа функционирования системы имеются степени свободы. Среди различных способов функционирования может существовать наилучший, поэтому возможна задача оптимизации, состоящая в выборе этого наилучшего варианта.

Оптимизация есть частный случай задачи представления систем, при котором из допустимых способов функционирования выбирается наилучший. Обязательным условием задачи оптимизации является наличие степеней свободы у оптимизируемой системы и некоторой функции R от ее состояния, по значению которой можно сравнивать ее различные варианты. В простейшем случае это скалярная функция. Она называется критерием оптимальности, а соответствующая задача – задачей однокритериальной оптимизации.

$$ExtrR(X(t), Z_0) \text{ при } F(X(t), Z_0) < 0. \quad (4.32)$$

Пример. Определим оптимальное значение времени пребывания реакционной массы в реакторах идеального смешения непрерывного и периодического действия, в которых протекают последовательные реакции



Статическая модель непрерывно действующего реактора идеального смешения имеет вид

$$\begin{cases} r_A + \frac{1}{\tau} C_A = \frac{1}{\tau} C_{A,ex} \\ r_P - \frac{1}{\tau} C_P = 0 \\ r_A - k_1 C_A = 0 \\ r_A - k_1 C_A - k_2 C_P = 0 \end{cases} \quad (4.33)$$

Решение этой системы уравнений имеет вид

$$C_A = \frac{C_{A,ex}}{1 + \tau k_1} \quad (4.34)$$

$$C_A = \frac{\tau k_1 C_{A,ex}}{(1 + \tau k_1)(1 + \tau k_2)} \quad (4.35)$$

$$r_A = \frac{C_{A,ex}}{1 + \tau k_1} \quad (4.36)$$

$$r_A = \frac{\tau k_1 C_{A,ex}}{(1 + \tau k_1)(1 + \tau k_2)} \quad (4.37)$$

Определим время пребывания реакционной массы в реакторе идеального смешения, при котором достигается максимальный выход $\varphi_P = \frac{C_A}{C_{A,ex}}$ продукта Р, применив необходимое и достаточное условия существования экстремума.

Продифференцировав $\varphi_P = (t)$ по t и приравняв производную нулю, получим

$$1 - \tau k_1 k_2 = 0$$

откуда

$$\tau_{\text{опт}} = \frac{1}{\sqrt{k_1 k_2}}$$

Для проверки, действительно ли при значении $\phi = \phi_{\text{онм}}$ достигается максимум φ_P , вычислим производную в точке $\phi = \phi_{\text{онм}}$.

$$\left. \frac{d^2 \varphi_P(t)}{d\tau^2} \right|_{\tau=\tau_{\text{опт}}} = -2\sqrt{k_1 k_2}$$

Так как k_1 и k_2 – положительные величины, то

$$\left. \frac{d^2 \varphi_P(t)}{d\tau^2} \right|_{\tau=\tau_{\text{опт}}} < 0.$$

То есть в точке $\phi = \phi_{\text{онм}}$ имеет место максимум. Определим время пребывания реакционной массы в реакторе периодического действия. Модель реактора имеет вид совместной системы дифференциальных и алгебраических уравнений

$$\begin{cases} \frac{dC_A(t)}{dt} + r_A(t) = 0 & C_A(0) = C_{A0} \\ \frac{dC_P(t)}{dt} + r_P(t) = 0 & C_P(0) = 0 \\ r_A(t) - k_1 C_A(t) = 0 \\ r_A(t) + k_1 C_A(t) - k_2 C_P(t) = 0 \end{cases}$$

Решив систему алгебраических уравнений относительно переменных $r_A(t)$ и $r_P(t)$ и подставив полученные решения в подсистему дифференциальных уравнений, получим задачу Коши для системы дифференциальных уравнений.

$$\begin{cases} \frac{dC_A(t)}{dt} + k_1 C_A(t) = 0 & C_A(0) = C_{A0} \\ \frac{dC_P(t)}{dt} + k_1 C_A(t) - k_2 C_P(t) = 0 & C_P(0) = 0 \end{cases}$$

Решив эту систему, получим $C_A(t)$ и $C_P(t)$:

$$C_A(t) = C_{A0} e^{-k_1 t}$$

$$C_P(t) = C_{A0} \frac{k_1}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t})$$

Подставив полученное решение в алгебраическую подсистему, получим значения $r_A(t)$ и $r_P(t)$

$$r_A(t) = k_1 C_{A0} e^{-k_1 t}$$

$$r_P(t) = \frac{k_1^2}{k_2 - k_1} C_{A0} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t})$$

Применив необходимое и достаточное условие экстремума функции $u_p = \frac{C_A}{C_{A, \text{ex}}}$ получим значение $\phi_{\text{опт}}$, при котором достигается максимальный выход $u_{p \text{max}}$ продукта Р:

$$\tau_{\text{opt}} = \frac{\ln \left(\frac{k_2}{k_1} \right)}{k_2 - k_1}$$

Обычно требуется, чтобы ХТС удовлетворяла нескольким, часто противоречивым критериям. В этом случае имеет место задача многокритериальной оптимизации, заключающаяся в выборе наилучшего варианта системы. В отличие от оптимизации по единственному критерию в результате многокритериальной оптимизации обычно находят область наилучших решений, которая называется областью Парето.

Задача *прогнозирования* состоит в предсказании поведения системы по заданным отображениям F , G или $\tilde{F}$ и **начальному состоянию** Z_0 . Обычно прогнозируется выход системы $Y(t)$. Так как для открытых систем опреде-

лено изображение G , связывающее выход с состоянием, то можно выполнить прогнозирование в пространстве состояний.

Например, в модели реактора идеального смешения состояние и выход совпадают. Поэтому, решая приведенную выше систему уравнений 4.23 (динамическая модель), можно осуществлять прогнозирование выхода (или состояния) реактора.

Наблюдаемостью называется возможность определить состояние системы по заданным значениям ее входа и выхода. Задача состоит в определении состояния в момент t_1 , если известен вход $X(t)$ и выход в момент t_1 .

Для этого необходимо разрешить уравнение $Y(t) = G(t, Z(t))$ относительно $Z(t)$ для момента времени t_1 . Если размерность уравнения $Y(t) = G(t, Z(t))$ равна размерности $Z(t)$, т.е. уравнения системы независимы, то можно определить единственное состояние $Z(t_1)$.

Однако, так как множество состояний имеет большую мощность, чем множество выходов $Z(t_1)$, то по значению Y в единственной точке t обычно невозможно определить значение $Z(t_1)$. Поэтому единственному значению Y_1 соответствует множество состояний Z системы, и для определения состояний необходимо иметь информацию о значении выходов в различные моменты времени.

Наблюдаемость зависит от входа $X(t)$. Наблюдаемость называется полной, если по выходу $Y(t_0, t_1)$, где $t_0 < t_1$ следует возможность оценки любого состояния в момент t_0 .

Под *реконструкцией (оцениванием)* понимают определение состояния системы в момент по выходу, наблюдаемому на интервале $[t_0, t_1]$, где $t_0 < t_1$. Эта задача отличается от задачи наблюдаемости только, если функция G явно зависит от t .

Итак, в общем случае исходной информацией для идентификации являются реализации входных и выходных переменных, полученные в условиях нормального функционирования объекта. Это положение сразу же налагает ряд существенных требований, что приводит к ряду задач, практическое решение которых имеет первостепенное значение, но, к сожалению, сопряжено с рядом трудностей.

В первую очередь возникает задача о необходимости ограничения количества входных переменных, включаемых в рассмотрение и определяющих приближенно заданную цель, заданные выходные переменные. Решение этой задачи во многом определяется априорной информацией об объекте. Однако для сложного промышленного объекта, управление которым собственно и требует проведения идентификации, априорная информация часто мала и не дает возможности до опыта точно установить необходимое количество входных переменных. Это обстоятельство в большинстве случаев обусловлено тем, что имеющиеся уравнения исследуемого процесса

хорошо описывают объект в идеальных условиях. Но эти закономерности не выполняются вовсе или выполняются слабее в реальных условиях производства.

Таким образом, оценка степени и формы связи между входными и выходными величинами должна быть произведена по реализациям этих величин, полученным в условиях реального функционирования объекта.

Далее, построение модели для конкретного объекта требует отнесения последнего к известному классу объектов, т.е. предполагается, что имеется заранее подготовленная классификация множества объектов и при идентификации по результатам измерений входа и выхода данный объект необходимо отнести к определенному классу. Трудность этой задачи очевидна, и при наличии полного каталога возможных систем разумная постановка задачи заключается в проверке гипотезы о принадлежности данного объекта к данному классу на основании обработанной реализации входных и выходных сигналов.

По реализации входных и выходных переменных необходимо решать задачу, с помощью какой модели может быть представлен данный объект (линейной или нелинейной, стационарной или нестационарной, безынерционной или динамической); можно ли ограничиться одноразовой моделью или необходимо постоянно ее уточнять, какова степень адекватности (изоморфности), представленная данной моделью, и др. Круг этих задач широк, и их решение сопряжено с большими теоретическими и практическими трудностями. Однако игнорировать эти задачи не представляется возможным, так как они являются неотъемлемой частью идентификации и от их решения зависит качество идентификации.

Вопросы самоконтроля

1. На какие две группы можно условно разделить все многообразие математических моделей?
2. Что представляют собой конечные уравнения?
3. Для каких аппаратов и режимов применимы конечные уравнения?
4. Как различаются дифференциальные уравнения?
5. Какие системы описывают уравнения в обыкновенных производных?
6. Какие системы описывают уравнения в частных производных?
7. Какие уравнения относят к независимым? Пример.
8. Что представляет собой задача граничных условий?
9. Назовите независимые переменные, чаще всего используемые при моделировании химико-технологических процессов.
10. Назовите зависимые переменные, чаще всего используемые при моделировании химико-технологических процессов.
11. Когда граничные условия переходят в краевые?

12. Чем определяется число граничных условий?
13. Какие типы краевых условий характерны для уравнений с распределенными параметрами?
14. Какова роль ограничений на переменные системы?
15. Какой вид ограничений на переменные системы?
16. Как различают ограничения?
17. Что представляют собой допущения?
18. Точность, экономичность, робастность и продуктивность математической модели при использовании допущений.
19. Какие процессы являются нестационарными?
20. Какие процессы являются стационарными?
21. Что представляют собой статические модели?
22. Что представляют собой динамические модели?
23. Что представляют собой модели с сосредоточенными параметрами?
24. Что представляют собой модели с распределенными параметрами?
25. Что называется графом?
26. Путь, контур, петля орграфа.
27. Как строится матрица смежностей?
28. Как строится матрица инцидентностей?
29. Основные типы потоковых графов.
30. На какие классы делят методы по определению параметров состояния потоков ХТС?
31. Достоинства и недостатки интегральных методов.
32. Достоинства и недостатки декомпозиционных методов.
33. Как осуществляется расчет разомкнутых и замкнутых ХТС?
34. Краткая характеристика этапов решения задач анализа структуры ХТС.
35. Основные задачи при анализе и синтезе ХТС.

Литература

1. *Андросов И.В.* Оптимизация и оптимальное проектирование объектов химической технологии с применением ЭВМ / И.В. Андросов, Н.В. Халепа, Г.В. Цибизов. - Тула, 1993.
2. *Батунер Л.М.* Математические методы в химической технике. – 6-е изд., исправленное / Л.М. Батунер, М.Е. Позин / Под ред. М.Е. Позина. - Л.: Химия, 1971. – 824 с.
3. *Бельков В.П.* Математические модели химико-технологических процессов / В.П. Бельков, В.В. Шестопапов, В.В. Кафаров. - Ч.2. - М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева, 1981. – 40 с.
4. *Берцун В.Н.* Математическое моделирование на графах. Часть 2: Томск: Изд-во Том. Ун-та, 2013. – 88с.

5. *Бондарь А.Г.* Математическое моделирование в химической технологии / А.Г. Бондарь. – Киев: Вища школа, 1973. – 280 с.

6. *Гордеев Л.С.* Математическое моделирование химико-технологических систем / Л.С. Гордеев, Е.С. Кадосова, В.В. Марков, Ю.В. Сбоева. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 1999. – Ч.1. Методологические и теоретические основы: Текст лекций. – 48 с.

7. *Гребенник А.В.* Компьютерная обработка результатов эксперимента и моделирование в лабораторном практикуме по физической химии / А.В. Гребенник / Под ред. А.В. Вишнякова. – М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 1999. – 80 с.

8. *Дворецкий Д.С.* Компьютерное моделирование биотехнологических процессов и систем / Д.С. Дворецкий, С.И. Дворецкий, Е.И. Муратова, А.А. Ермаков. – Тамбов: ТГТУ, 2005. – 80 с.

9. Графы. <http://www.allbest.ru/>

10. *Кафаров В.В.* Принципы математического моделирования химико-технологических процессов / В.В. Кафаров, В.Л. Перов, В.П. Мешалкин. – М.: Химия, 1974. – 344 с.

11. *Кафаров В.В.* Анализ и синтез химико-технологических систем: учебник для вузов / В.В. Кафаров, В.П. Мешалкин. – М.: Химия, 1991. – 432 с.

12. *Литовка Ю.В.* Получение оптимальных проектных решений и их анализ с использованием математических моделей / Ю.В. Литовка. – Тамбов: ТГТУ, 2006. – 160 с.

13. *Саулин Д.В.* Математическое моделирование химико-технологических систем: Конспект лекций / Д.В. Саулин. – Пермь: Перм.гос.техн.ун-т., 2003. – 91 с.

14. Статистические и динамические характеристики объектов управления. <http://www.allbest.ru/>

15. *Федорова С.А.* Методические указания по дисциплине «Математическое моделирование и применение ЭВМ в химической технологии для студентов заочной формы обучения» / С.А. Федорова. – Севастополь: СИЯЭиП, 2001. – 68 с.

16. *Чермак И.* Динамика регулируемых систем в теплоэнергетике и химии / И. Чермак, В. Петерка, И. Заборка. – М.: Мир, 1972. – 623 с.

Л е к ц и я № 5

ОСНОВНЫЕ ТИПЫ МОДЕЛЕЙ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

Все многообразие взаимодействующих диффузионных и тепловых потоков с учетом распределения по времени пребывания можно формализовать в виде типовых математических моделей:

- идеального вытеснения;
- идеального перемешивания;
- диффузионной;
- ячеечной;
- комбинированной.

Перечисленные типовые модели отвечают следующим требованиям:

- отражают основные физические закономерности реального потока в рассматриваемых условиях;
- являются достаточно простыми;
- позволяют экспериментально или теоретически определять параметры модели;
- дают возможность их использования для расчета конкретных процессов.

В зависимости от типа химико-технологического объекта, в математическую модель могут входить следующие системы уравнений: гидродинамики, кинетики тепло- и массообмена, кинетики химических реакций.

Гидродинамические уравнения используются в том случае, если через моделируемый объект осуществляется непрерывный проток реакционной смеси. При описании движения среды используются следующие модели.

1. Модели РИС и РИВ

Модель идеального смешения соответствует аппарату, в котором поступающее вещество мгновенно распределяется по всему объему аппарата. Концентрация вещества в любой точке аппарата равна концентрации на выходе из него.

Уравнение модели идеального смешения записывается в виде

$$V \frac{dC}{dt} = \nu(C_{\text{вх}} - C), \quad (5.1)$$

где $C_{\text{вх}}$ - концентрация вещества на входе;

C - концентрация вещества в аппарате и на выходе из аппарата;

V - объем аппарата;

ν - объемный расход потока через аппарат.

Уравнения материального баланса в общем виде

$$\frac{dM}{d\tau} = m_{\text{вх}}(\tau) - m_{\text{вых}}(\tau); \quad (5.2)$$

$$\frac{d(M(\tau)C_{\text{вых}}(\tau))}{d\tau} = m_{\text{вх}}(\tau)C_{\text{вх}}(\tau) - m_{\text{вых}}(\tau)C_{\text{вых}}(\tau) \quad (5.3)$$

где M – масса среды в аппарате; τ – время;

$m_{\text{вх}}$, $m_{\text{вых}}$ – массовый расход, соответственно, на входе и выходе аппарата;

$C_{\text{вх}}$, $C_{\text{вых}}$ – концентрация, соответственно, на входе и выходе аппарата.

Важен частный случай: $m_{\text{вх}} = m_{\text{вых}} = m$. Тогда $\frac{dM}{d\tau} = 0$, откуда $M = \text{const}$ и, следовательно,

$$\frac{\partial C_{\text{вых}}(\tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{\tau_s} (C_{\text{вх}}(\tau) - C_{\text{вых}}(\tau)), \quad (5.4)$$

где $\tau_s = \frac{M}{m}$ – среднее время пребывания среды в аппарате.

Модели РИС используются – для описания реакторов с мешалкой, барботажных аппаратов, реакторов с псевдоожиженным слоем и др.

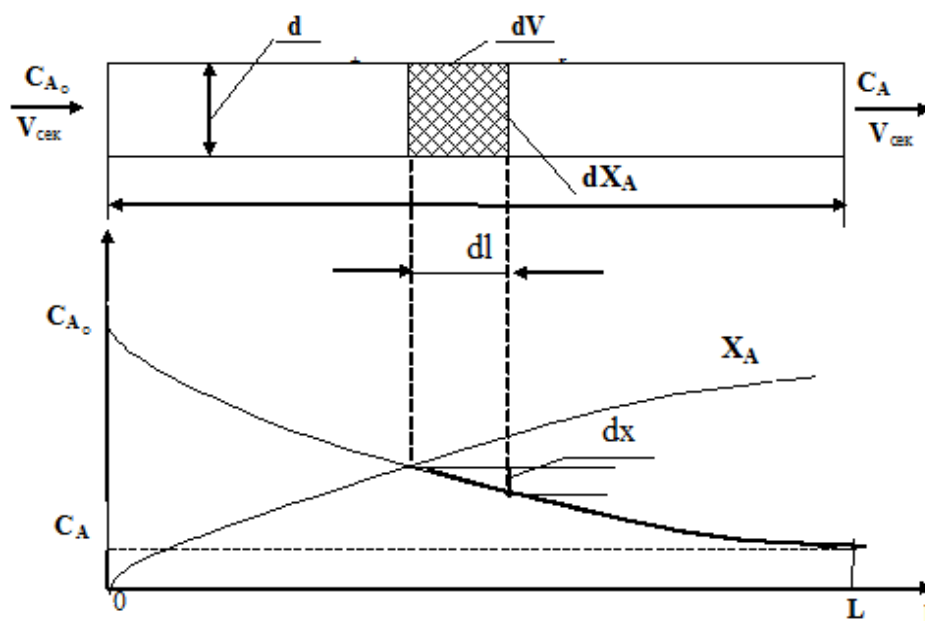


Рис. 5.1. Модель реактора идеального вытеснения

В основе *модели идеального вытеснения* лежит допущение о поршневом течении без перемешивания вдоль потока при равномерном распределении вещества в направлении, перпендикулярном движению. Время пребывания всех частиц в системе одинаково и равно отношению объема системы к объему жидкости.

Математическое описание модели имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad (5.5)$$

где t - время;

C - концентрация субстанции (вещества или энергии);

u - линейная скорость потока;

x - координата, вдоль которой перемещается вещество.

Решение уравнения (5.5), удовлетворяющее начальному условию

$$C(0, x) = C_H(x) \quad \text{при} \quad t = 0, \quad 0 < x \leq \ell \quad (5.6)$$

и граничному условию

$$C(t, 0) = C_{BX}(t) \quad \text{при} \quad x = 0, \quad t > 0 \quad (5.7)$$

$$\text{есть } C(t, \ell) = \begin{cases} C_H(\ell - t u), & t < \frac{\ell}{u}; \\ C_{BX}(t - \frac{\ell}{u}), & t \geq \frac{\ell}{u} \end{cases}. \quad (5.8)$$

Из решения (5.8) следует, что любое изменение концентрации на входе в аппарат идеального вытеснения появляется на его выходе через время, равное среднему времени пребывания $\bar{t} = l/u$ (где l - длина аппарата).

Или в системе распределенных параметров

$$\frac{\partial C(\tau, l)}{\partial \tau} = -u \frac{\partial C(\tau, l)}{\partial l}, \quad (5.9)$$

где l – длина трубы реактора; u – скорость движения среды по трубе.

Такой поток, например, имеет место в трубчатом аппарате при турбулентном режиме течения жидкости через него. В этом случае профиль скоростей можно считать равномерным, т.е. считать одинаковым время пребывания отдельных элементов потока.

2. Однопараметрическая диффузионная гидродинамическая модель

Однопараметрическая диффузионная гидродинамическая модель – используется для описания распылительных и насадочных колонн. В основе диффузионной модели лежит допущение, что структура потока описывается уравнением, аналогичным уравнению молекулярной диффузии. Параметром модели является коэффициент продольного перемешивания,

называемый также коэффициентом турбулентной диффузии (или коэффициентом обратного перемешивания).

При составлении однопараметрической диффузионной модели принимаются следующие допущения:

- изменение концентрации вещества является непрерывной функцией координаты (расстояния);
- концентрация вещества в данном сечении постоянна;
- объемная скорость потока и коэффициент продольного перемешивания не изменяются по длине и сечению потока.

Для вывода уравнения модели составим уравнение материального баланса для элемента аппарата Δx , как показано на рис. 5.2.

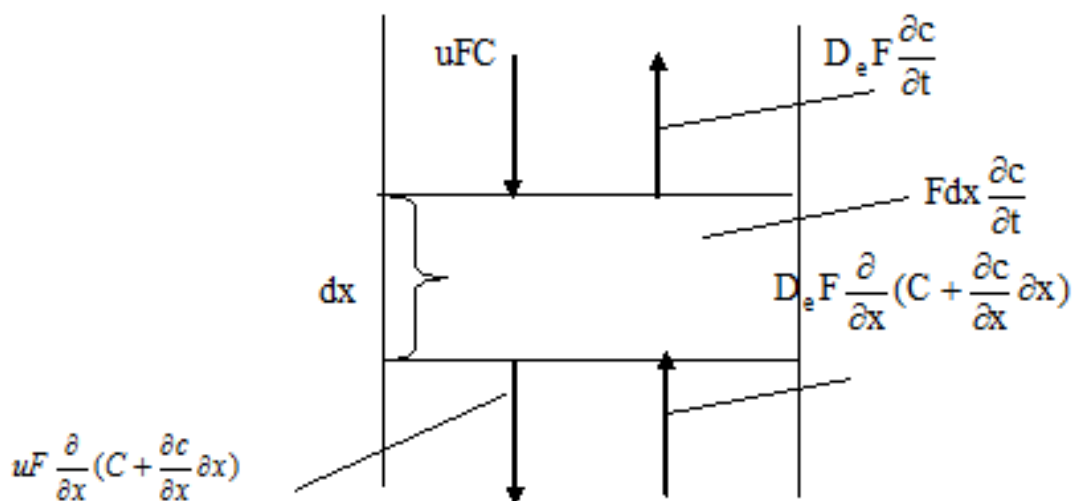


Рис. 5.2. К выводу уравнения диффузионной модели

Приняты следующие обозначения:

F - сечение аппарата, м^2 ;

u - скорость потока, м/с ;

t - время, с ;

C - концентрация, кг/м^3 ;

D_e - коэффициент продольного перемешивания, $\text{м}^2/\text{с}$.

В рассматриваемый элемент поступают конвективный поток uFC и поток, вызываемый турбулентной диффузией $D_e F \frac{\partial}{\partial x} (C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x)$, а покидают рассматриваемый элемент конвективный поток $uF(C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x)$ и поток, вызываемый турбулентной диффузией $D_e F \frac{\partial C}{\partial x}$.

В соответствии с законом сохранения массы разность между входящими и выходящими потоками должна составлять накопление вещества (индикатора) в рассматриваемом элементе. Она равна $F \Delta x \frac{\partial C}{\partial t}$.

Запишем теперь уравнение сохранения массы:

$$\text{Накопление} = \text{Приход вещества} - \text{Расход вещества} \quad (5.10)$$

или

$$Fdx \frac{\partial C}{\partial t} = uFc + D_e F \frac{\partial}{\partial x} (C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x) - uF(C + \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x) - D_e F \frac{\partial C}{\partial x} \quad (5.11)$$

Преобразуя последнее уравнение и переходя к пределу при $\Delta x \rightarrow 0$, получаем

$$\frac{\partial C}{\partial t} = De \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \frac{\partial C}{\partial x} . \quad (5.12)$$

Уравнение (5.12) является основным уравнением диффузионной модели, и отличается от уравнения (5.1) введением дополнительного члена $De \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$, учитывающего турбулентную диффузию или перемешивание.

В системе распределенных параметров уравнение принимает вид

$$\frac{\partial C(\tau, l)}{\partial \tau} = -u \frac{\partial C(\tau, l)}{\partial l} + D_z \frac{\partial^2 C(\tau, l)}{\partial l^2}, \quad (5.13)$$

где D_z – коэффициент продольной диффузии.

3. Двухпараметрическая диффузионная модель

В этой модели учитывается перемешивание потока в продольном и радиальном направлениях, причем модель характеризуется коэффициентами продольного D_e и радиального D_R перемешивания. При этом принимается, что величины D_e и D_R не изменяются по длине и сечению аппарата, а скорость постоянна.

При условии движения потока в аппарате цилиндрической формы радиуса R с постоянной по длине и сечению скоростью уравнение двухпараметрической модели имеет вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -u \frac{\partial C}{\partial x} + De \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{D_R}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial C}{\partial R} \right). \quad (5.14)$$

При опытном определении коэффициентов продольного и радиального перемешивания D_e и D_R их обычно представляют в виде безразмерных комплексов - критериев Пекле $Pe_l = \frac{ul}{D_e}$ или $Pe_R = \frac{ul}{D_R}$, где l - определяющий линейный размер системы.

В этом случае уравнение диффузионной модели также приводится к

безразмерному виду. С этой целью вводится безразмерная концентрация $\frac{C}{C_0} = C$, безразмерная длина $\frac{l}{L} = z$ и время $t = \frac{L}{u} = \frac{V}{V_c}$, где V - объем системы, V_c - объемная скорость потока.

Учитывая, что объемная скорость принимается постоянной, уравнение (5.12) приводится к виду

$$-\frac{dC}{dz} + \frac{De}{wL} \frac{d^2C}{dz^2} = 0. \quad (5.15)$$

Если $\frac{D_L}{wL} = 0$ ($Pe = \infty$), диффузионная модель переходит в модель идеального вытеснения; если $\frac{D_L}{wL} = \infty$ ($Pe_L = 0$), диффузионная модель переходит в модель идеального смешения.

4. Ячеечная и комбинированные модели

Рассматриваемая *ячеечная модель*, впервые предложенная для каскада реакторов с мешалками, является одной из наиболее простых. В этом случае аппарат состоит из ряда последовательно соединенных ячеек, через которые проходит поток вещества (рис. 5.3).

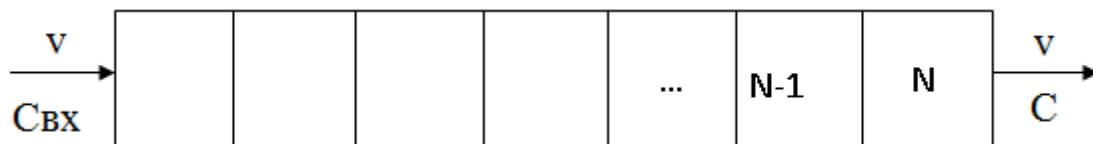


Рис. 5.3 Схема ячеечной модели: v – расход вещества через аппарат;
 $C_{вх}$ – концентрация на входе

Сделаем следующие допущения:

- в каждой ячейке осуществляется идеальное перемешивание;
- между ячейками отсутствует обратное перемешивание.

Параметром ячеечной модели, количественно характеризующим продольное перемешивание, служит число ячеек перемешивания N .

С увеличением N структура потока приближается к модели полного вытеснения, а с уменьшением N – к модели идеального смешения.

Запишем уравнения сохранения массы для каждой из ячеек (для простоты предположим, что ячейки имеют одинаковый объем $V_{я}$):

$$\left\{ \begin{array}{l} vC_{BX} - vC_1 = V_{\mathcal{A}} \frac{dC_1}{dt} \\ vC_1 - vC_2 = V_2 \frac{dC_2}{dt} \\ \dots\dots\dots \\ vC_{j-1} - vC_j = V_{\mathcal{A}} \frac{dC_j}{dt} \\ \dots\dots\dots \\ vC_{N-1} - vC_N = V_{\mathcal{A}} \frac{dC_N}{dt} \end{array} \right. \quad (5.16)$$

Разделив левую и правую части уравнений (5.16) на расход v , получаем:

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{BX} - C_1 \equiv \bar{t} \frac{dC_1}{dt} \\ C_1 - C_2 = \bar{t} \frac{dC_2}{dt} \\ \dots\dots\dots \\ C_{j-1} - C_j = \bar{t} \frac{dC_j}{dt} \\ \dots\dots\dots \\ C_{N-1} - C_N = \bar{t} \frac{dC_N}{dt} \end{array} \right. \quad (5.17)$$

Соответствующие начальные условия для системы уравнений (5.17) имеют вид

$$C_1 = C_{1H}, C_2 = C_{2H}, \dots C_N = C_{NH} \quad \text{при } t = 0 \quad (5.18)$$

Система уравнений (5.17) вместе с начальными условиями (5.18) образуют ячеечную модель структуры потоков.

Ячеечная модель не всегда обеспечивает адекватное воспроизведение структуры потоков в реальном аппарате. В связи с этим разработаны модификации такой модели, например, ячеечная модель с обратными потоками (рециркуляционная).

Комбинированные модели. При характеристике движения реальных потоков может оказаться, что ни одна из перечисленных гидродинамических моделей не дает возможности достаточно точно воспроизвести свойства потока. В таких случаях применяют сложные комбинированные мо-

дели, построенные на основе приведенных выше простейших моделей с добавлением застойных зон, введением байпасирования и рециркуляции отдельных частей потоков. Математическое описание при этом усложняется, однако в результате удастся получить необходимую точность воспроизведения свойств объекта моделирования.

При построении комбинированных моделей аппарат разбивают на ряд отдельных зон с различным механизмом и степенью перемешивания. Эти зоны могут соединяться последовательно или параллельно, могут быть как изолированными от окружающего пространства, так и взаимодействовать с соседними зонами.

Увеличением количества зон можно описать процесс любой сложности, но математическое моделирование при этом усложняется.

Например, комбинированная модель «идеальное вытеснение» и циркуляция

$$\begin{cases} \frac{\partial C(\tau, l)}{\partial \tau} = -u \frac{\partial C(\tau, l)}{\partial l} \\ C(0, l) = 0 \\ C(\tau, 0) = C_{\text{в}}(\tau) \\ C_{\text{вх}}(\tau) + \kappa_{\text{ц}} C_{\text{вых}}(\tau) = (1 + \kappa_{\text{ц}}) C_{\text{в}}(\tau) \end{cases} \quad (5.19)$$

где $C_{\text{в}}$ – концентрация на входе элемента «идеальное вытеснение»; $\kappa_{\text{ц}}$ – коэффициент циркуляции.

Если в объекте протекают химические реакции, необходимо использовать уравнения формальной кинетики, имеющие вид

$$\frac{\partial C_i}{\partial \tau} = k(T) S_i C_1^{\alpha_1} C_2^{\alpha_2} \dots C_n^{\alpha_n}, \quad (5.20)$$

где C_i – концентрация i -го вещества, участвующего в химической реакции;

k – константа скорости реакции;

T – абсолютная температура;

α_i – порядок реакции по i -му веществу;

S_i – стехиометрический коэффициент для i -го вещества.

Зависимость константы скорости реакции от температуры определяется уравнением Аррениуса

$$k = A \exp(-E/RT), \quad (5.21)$$

где A – предэкспоненциальный множитель; E – энергия активации; R – универсальная газовая постоянная.

Если через некоторый объект осуществляется проток среды и в нем протекают химические реакции, необходимо использовать уравнения гидродинамики и химической кинетики.

Например, в реакторе с мешалкой протекает реакция (5.22). Гидродинамический режим такого объекта близок к идеальному смешению. Система уравнений объединит уравнение (5.4) и систему (5.23):



$$\begin{cases} \frac{dC_1}{d\tau} = -k S_1 C_1 C_2 \\ \frac{dC_2}{d\tau} = -k S_2 C_1 C_2 \\ \frac{dC_3}{d\tau} = k S_3 C_1 C_2 \end{cases} \quad (5.23)$$

В результате чего получаем модель (5.24), учитывающую гидродинамическую модель РИС и кинетику химической реакции.

$$\begin{cases} \frac{\partial C_1(\tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{\tau_s} (C_{ex} - C_1) - k S_1 C_1 C_2 \\ \frac{\partial C_2(\tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{\tau_s} (C_{ex} - C_2) - k S_2 C_1 C_2 \\ \frac{\partial C_3(\tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{\tau_s} C_3 + k S_3 C_1 C_2 \end{cases} \quad (5.24)$$

Уравнение (5.24) записано, исходя из того, что $C_{3вх} = 0$.

5. Типовые уравнения основных процессов ХТС

Если в объекте протекают процессы массопереноса, необходимо использовать уравнения основных законов массопередачи.

Уравнение массопроводности, учитывающее перемещение жидкой или газообразной фазы в твердой фазе, имеет вид

$$dm = -k_m \frac{\partial C}{\partial x} dF, \quad (5.25)$$

где dm – количество вещества, переместившееся в твердой фазе в единицу времени;

k_m – коэффициент массопроводности;

∂C – градиент концентрации перемещаемой фазы;

x – направление движения потока массы;

dF – площадь, через которую перемещается вещество.

Перенос вещества от границы раздела фаз в ядро потока описывается уравнением массоотдачи (закон Шюкарева)

$$dm = \beta(C_n - C_{\text{я}})dF, \quad (5.26)$$

где β – коэффициент массоотдачи;

C_n – концентрация у поверхности раздела фаз;

$C_{\text{я}}$ – концентрация в ядре потока.

Молекулярная диффузия в потоке жидкости или газа описывается первым законом Фика

$$dm = -D \frac{\partial C}{\partial x} dF, \quad (5.27)$$

где D – коэффициент диффузии.

Если в объекте протекают тепловые процессы (теплообмен с внешней средой, выделение или поглощение тепла вследствие химических реакций) – необходимо использовать уравнения кинетики теплопереноса.

Основное уравнение теплопередачи

$$q = k_m \Delta tF, \quad (5.28)$$

где k_m – коэффициент теплопередачи; Δt – разность температур.

Уравнение теплопроводности, учитывающее распространение тепла в твердых телах и в тонких слоях жидкостей или газов, имеет вид

$$dq = -\lambda \frac{\partial t}{\partial x} dF dF, \quad (5.29)$$

где dq – количество тепла, переданного теплопроводностью в единицу времени;

λ – коэффициент теплопроводности;

$\frac{\partial t}{\partial x}$ – градиент температуры.

Перенос тепла от границы раздела фаз в ядро потока описывается уравнением теплоотдачи

$$dq = \alpha_t (t_n - t_{\text{я}})dF, \quad (5.30)$$

где α_t – коэффициент теплоотдачи;

t_n – температура на поверхности;

$t_{\text{я}}$ – температура в ядре потока.

В уравнении теплового баланса учитываются все тепловые потоки, входящие в реактор и выходящие из него. Такими потоками являются: $Q_{\text{вх}}$ – физическая теплота реакционной смеси, входящей в элементарный объ-

ем, для которого составляется баланс (входной поток); $Q_{\text{вых}}$ - физическая теплота реакционной смеси, покидающей элементарный объем (выходной поток); $Q_{\text{х.р}}$ - теплота химической реакции; $Q_{\text{т.о}}$ - теплота, расходуемая на теплообмен с окружающей средой (в зависимости от соотношения температур в реакторе и в окружающей среде или в теплообменном устройстве этот поток может быть также направлен и в объем, и из него); $Q_{\text{ф.пр}}$ - теплота фазовых превращений.

Для стационарного режима работы реактора алгебраическая сумма всех тепловых потоков равна нулю

$$Q_{\text{вх}} - Q_{\text{вых}} \pm Q_{\text{х.р}} \pm Q_{\text{т.о}} \pm Q_{\text{ф.пр}} = 0. \quad (5.31)$$

В нестационарном режиме происходит положительное или отрицательное накопление теплоты в элементарном объеме

$$Q_{\text{вх}} - Q_{\text{вых}} \pm Q_{\text{х.р}} \pm Q_{\text{т.о}} \pm Q_{\text{ф.пр}} = Q_{\text{нак}}. \quad (5.32)$$

Уравнения (5.30) и (5.31) являются общими уравнениями теплового баланса химического реактора. Конкретный вид уравнения теплового баланса зависит от вида теплового режима и гидродинамической обстановки в реакторе. Различают несколько видов тепловых режимов химических реакторов. Рассмотрим различные тепловые режимы реакторов, в которых не происходит фазовых превращений.

Изотермический режим характеризуется тем, что температура реакционной смеси, входящая в реактор, равна температуре в реакторе и температуре смеси, покидающей реактор. Это возможно, если выделение или поглощение теплоты в результате химической реакции полностью компенсируется теплообменом с окружающей средой. Для стационарного изотермического режима при постоянстве физических свойств системы можно записать

$$Q_{\text{вх}} = Q_{\text{вых}}; \quad (5.33)$$

$$Q_{\text{х.р}} = Q_{\text{т.о}}. \quad (5.34)$$

Адиабатический режим характеризуется полным отсутствием теплообмена с окружающей средой. В этом случае вся теплота химической реакции полностью расходуется на нагрев или охлаждение реакционной смеси. Для стационарного адиабатического режима

$$|Q_{\text{вх}} - Q_{\text{вых}}| = |Q_{\text{х.р}}|. \quad (5.35)$$

Промежуточный режим характеризуется тем, что частично теплота химической реакции расходуется на изменение теплосодержания (нагрев или охлаждение) реакционной смеси, частично - на теплообмен с окружающей средой. Этот режим наиболее часто встречается в реальных химических реакторах.

Промежуточный тепловой режим описывается полным уравнением теплового баланса (5.31).

При этом следует помнить, что при составлении математической модели мы можем накладывать допущения, иначе говоря, не учитывать величины, значениями которых можно пренебречь. Т.е. предполагаем, что их вклад в общую систему невелик. Правильность допущения проверяем по адекватности. Если полученная модель адекватно описывает процесс, то допущение было сделано верно.

Например, проточный реактор идеального смешения в неизотермическом режиме.

При составлении балансовых уравнений в качестве элементарного объема для реактора идеального смешения принимают полный реакционный объем V . Тепловые потоки за элементарный промежуток времени $d\phi$ для объема V составят

$$Q_{\text{вх}} = x_0 C_{p,0} c_0 T_0 d\phi; \quad (5.36)$$

$$Q_{\text{вых}} = x C_p c T d\phi; \quad (5.37)$$

$$Q_{\text{х.р}} = \Delta H V W_{\text{г}} d\phi; \quad (5.38)$$

$$Q_{\text{т.о}} = k_{\text{т}} F_{\text{т.о}} \Delta T_{\text{т.о}} d\phi, \quad (5.39)$$

где $k_{\text{т}}$ – коэффициент теплопередачи; F – поверхность теплообмена с окружающей средой; $\Delta T_{\text{т.о}}$ – движущая сила теплообмена (средняя разность температур в реакторе и внешней среде, с которой происходит теплообмен); индексом «0» отмечены величины, относящиеся к входному потоку, величины без индекса относятся к реакционной смеси.

Накопление теплоты в реакторе за время $d\phi$ равно изменению тепло-содержания реакционной смеси

$$Q_{\text{нак}} = d(V c c_p T). \quad (5.40)$$

С учетом уравнений (5.32), (5.34) – (5.39) уравнение теплового баланса для нестационарного режима будет иметь вид

$$x_0 C_{p,0} c_0 T_0 - x C_p c T - \Delta H W_{\text{га}} V \pm k_{\text{т}} F_{\text{т.о}} \Delta T_{\text{т.о}} = V d(c C_p T) / d\phi. \quad (5.41)$$

В стационарном режиме $d(c C_p T) = 0$. Если также принять, что $V_0 = V$ и пренебречь изменением средней теплоемкости и плотностью реакционной смеси при изменении состава и температуры (такое допущение возможно, если диапазон изменения температур ($T_0 - T$) невелик и в реакционной смеси не происходит фазовых превращений), то для стационарного режима можно записать

$$x C_p c (T_0 - T) - \Delta H W_{\text{га}} V \pm k_{\text{т}} F_{\text{т.о}} \Delta T_{\text{т.о}} = 0. \quad (5.42)$$

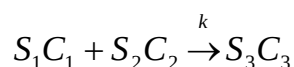
Математическая модель неизотермического реактора идеального смешения кроме уравнения теплового баланса (5.42) включает уравнение материального баланса

$$x(C_{A,0} - C_A) - W_{ra}V = 0. \quad (5.43)$$

Уравнения (5.41) и (5.43) взаимосвязаны: в оба входит в качестве составной части функция $W_{ra}(C_A, T)$. Скорость химической реакции W_{ra} зависит и от концентрации реагентов (степени превращения), и от температуры. Чем выше температура, тем выше скорость реакции и, следовательно, тем большая степень превращения должна достигаться при том же среднем времени пребывания ϕ . Но рост степени превращения автоматически должен приводить к понижению скорости реакции. В проточном реакторе заданного объема устанавливается степень превращения и температура, которые одновременно должны удовлетворять и уравнению (5.42), и уравнению (5.43).

При совместном решении уравнений (5.42) и (5.43) при заданных $\phi = V/x$ и начальной температуре T_0 можно определить значения X_A и T , удовлетворяющие этим уравнениям.

Рассмотрим **пример** сочетания гидродинамических и тепловых процессов. Пусть, например, в реакторе с мешалкой протекает экзотермическая реакция (5.22),



тепловой эффект которой равен Q_r [Дж/моль]. Для отвода тепла реактор охлаждают хладагентом, подаваемым в рубашку. Уравнение теплового баланса в этом случае будет иметь следующий вид:

$$\frac{dQ}{d\tau} = q_{вх} - q_{вых} - q_m + q_p, \quad (5.44)$$

где dQ – изменение тепла в объеме реактора;

$q_{вх}$ – поток тепла, поступающий с исходным веществом;

$q_{вых}$ – поток тепла, уходящий с продуктами реакций;

q_m – поток тепла, уходящий вследствие теплообмена;

q_p – поток тепла, выделяющегося в экзотермической реакции.

Распишем тепловые потоки

$$dQ = c_t V \rho dT ;$$

$$q_{вх} = c_t v_{вх} \rho T_{вх} ;$$

$$q_{вых} = c_t v_{вых} \rho T_{вых} ;$$

$$q_T = k_T F (T - T_T) ;$$

$$q_P = k C_1 C_2 Q_P V ,$$

где c_t – теплоемкость;

ρ – плотность реакционной среды;

$V_{\text{вх}}, V_{\text{вых}}$ – объемный расход реакционной среды, соответственно, на входе и выходе реактора;

$T_{\text{вх}}, T$ – температура реакционной среды на входе и выходе реактора;

T_T – температура хладагента.

Подставив тепловые потоки в уравнение (5.43) и приняв, что $V_{\text{вх}} = V_{\text{вых}} = v$, получим

$$\frac{dT}{d\tau} = \frac{v}{V} (T_{\text{вх}} - T) - \frac{k_T F}{c_t V \rho} (T - T_T) + \frac{k C_1 C_2 Q_P}{c_t \rho} . \quad (5.45)$$

6. Общая характеристика имитационного моделирования

Математические модели используются не только в задачах оптимизации проектируемого объекта, но и для проверки его работоспособности методами статистического анализа на этапе проектирования. К таким методам относятся методы «наихудшего случая» и имитационного моделирования.

Проверка работоспособности методом «наихудшего случая» заключается в расчете по математической модели множества значений выходных координат при подаче на вход предельно возможных отклонений внутренних и внешних координат от своих номинальных значений. Полученные выходные координаты сравниваются с допустимыми значениями $y_{\min}, y_{\max}$.

Метод имитационного моделирования заключается в постановке численного эксперимента на математической модели с целью оценить различные стратегии, обеспечивающие функционирование исследуемого объекта. Имитационная система включает генератор случайных процессов, математические модели и блок анализа результата (рис. 5.4).

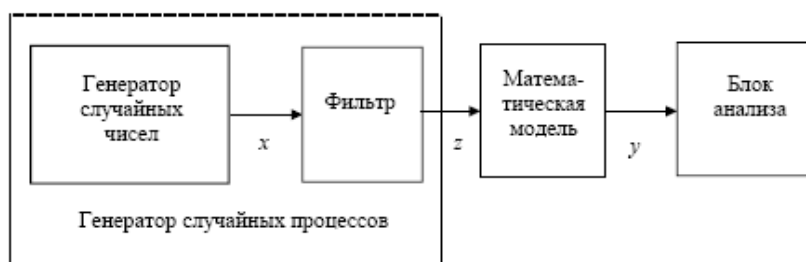


Рис. 5.4. Схема системы имитационного моделирования

Характеристики стационарных случайных процессов будем оценивать математическим ожиданием, дисперсией, корреляционной функцией

$$M \cong \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z_i ; \quad (5.46)$$

$$\sigma^2 \cong \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (z_i - M)^2 ; \quad (5.47)$$

$$K(S) \cong \frac{1}{N-S} \sum_{i=1}^{N-S} (z_i - M)(z_{i+1} - M), \quad (5.48)$$

где z_i – значение случайной функции $z(\phi)$ в момент времени ϕ_i ; N – количество измерений случайной функции.

При моделировании внешних воздействий целесообразно вместо отдельных точек корреляционной функции использовать некоторое аппроксимирующее математическое выражение, например:

$$K(S) = \sigma^2 \exp(-\alpha|S|), \quad (5.49)$$

где α – параметр аппроксимации.

Построение генератора случайных процессов начинается с проведения экспериментов на действующем объекте, аналогичном проектируемому, и получения ряда экспериментальных значений случайного процесса.

После этого полученный ряд обрабатывается, и находятся оценки $M_0, \sigma_0^2, \alpha_0$ характеристик случайного процесса.

Следующий этап – собственно построение генератора, на выходе которого должен формироваться случайный процесс с заданными характеристиками $M_0, \sigma_0^2, \alpha_0$.

Генератор случайных чисел может быть организован с использованием следующих методов.

1. Мультипликативный конгруэнтный алгоритм (метод вычетов). Каждое последующее случайное число x_{i+1} образуется из предыдущего x_i , согласно рекуррентному соотношению

$$x_{i+1} = \lambda_1 x_i \pmod{\lambda_2} \quad (5.50)$$

которое означает, что число x_{i+1} равно остатку от деления нацело на λ_2 , произведения числа x_i на постоянный множитель λ_1 .

Для получения случайных чисел из интервала $[-0,5; 0,5]$ используют выражение

$$x_i = \frac{x_i}{\lambda_2} - 0,5 . \quad (5.51)$$

2. Метод произведений. Произвольно выбираются два числа λ_1 и λ_2 , имеющие одинаковое число значащих цифр m , и находится их произведение $q = \lambda_1 \lambda_2$. Из всех значащих цифр произведения q выбираются m цифр, расположенных в середине числа q и эти цифры используются как случайное число λ_3 . Следующее случайное число λ_4 получается аналогично из произведения $\lambda_2 \lambda_3$ и т.д. Центрированная последовательность случайных чисел получается по формуле

$$x_i = \lambda_i - 0,5. \quad (5.52)$$

3. Получение псевдослучайных последовательностей из иррациональных чисел. Способ основан на свойстве иррациональных чисел образовывать неупорядоченную последовательность цифр дробной части при вычислении иррационального числа с достаточно высокой степенью точности. Алгоритм может быть записан в виде следующих формул:

$$x_0 = \{\lambda_1\} - 0,5; \quad x_i = \{\lambda_2 x_{i-1}\} - 0,5. \quad (5.53)$$

Здесь скобки $\{\}$ означают, что из числа, стоящего в скобках, берется только дробная часть; λ_1, λ_2 – иррациональные числа.

После получения ряда случайных чисел проверяется равенство нулю его математического ожидания M_x и вычисляется дисперсия σ_0^2 .

4. Метод сортировки. Метод основан на том, что коэффициент корреляции случайных чисел больше зависит от порядка их следования, чем от величины. Поэтому две псевдослучайные последовательности, соответствующие двум разным распределениям, в случае, если они упорядочены одинаковым образом, будут иметь примерно равные коэффициенты корреляции.

В соответствии с методом сортировки генерируется псевдослучайная последовательность $X(n)$ с заданной корреляционной функцией, но произвольным распределением. В соответствие ей ставится последовательность целых чисел $I(n) = n$. Затем обе последовательности попарно сортируются. При этом величины $X(n)$ располагаются по возрастанию, а массив $I(n)$ запоминает их предыдущее положение (места в неупорядоченном массиве $X(n)$). Таким образом, целочисленный массив $I(n)$ отображает корреляцию между элементами массива $X(n)$. После упорядочения массив $X(n)$ интереса не представляет, так как вся информация о корреляционной функции теперь содержится в массиве $I(n)$. Затем генерируется псевдослучайная последовательность $Y(n)$ с заданным распределением и нулевой корреляцией и записывается на место массива $X(n)$. После этого она сортируется в увеличивающемся порядке. Далее массивы $I(n)$ и $Y(n)$ попарно сортируются, причем массив $I(n)$ располагается в возрастающем порядке.

В результате выполнения данного алгоритма получим псевдослучайную числовую последовательность, содержащую величины, распределен-

ные по заданному закону и имеющие заданную корреляционную функцию.

Алгоритм сортировки целесообразно использовать в случаях, когда для статистического моделирования системы имеется небольшой объем статистических данных, не требующих оперирования числовыми массивами большой размерности.

5. Метод фильтрации. Используется для получения случайного процесса с заданной корреляцией и законом распределения вероятностей. В качестве исходного выбирается нормальный стационарный случайный процесс $X(t)$.

Всегда существует такое нелинейное безынерционное преобразование $Y = W_N(X)$, которое превращает нормальную функцию плотности $f_X(x)$ процесса $X(t)$ в заданную функцию плотности $f_Y(y)$. Если исходный процесс $X(t)$ имеет корреляционную функцию $R_{XX}(\tau)$, то преобразованный процесс $Y(t)$ будет иметь корреляционную функцию $R_{YY}(\tau)$, отличающуюся от функции $R_{XX}(\tau)$ и связанную с ней некоторой зависимостью $R_{YY} = \varphi(R_{XX})$. Вид этой зависимости определяется преобразованием $Y = W_N(X)$. Для того чтобы корреляционная функция преобразованного процесса была требуемой, необходимо выбрать корреляционную функцию исходного процесса

$$R_{XX}(\tau) = \varphi^*[R_{XX}(\tau)], \quad (5.54)$$

где φ^* - функция, обратная φ .

При использовании этого способа подготовительная работа состоит из нескольких этапов:

- нахождения функции преобразования $Y = W_N(X)$ по заданной функции плотности $f_Y(Y)$;
- получения по найденной функции $Y = W_N(X)$ зависимости $R_{YY} = \varphi(R_{XX})$;
- решения уравнения $R_{YY} = \varphi(R_{XX})$ относительно R_{XX} , т.е. определения корреляционной функции $R_{XX}(\tau)$ исходного нормального процесса $X(t)$.

После окончания подготовительной работы моделирование случайного процесса с заданными характеристиками сводится к формированию дискретных реализаций $X(n)$ нормального случайного процесса $X(r)$ и к преобразованию этих реализаций по формуле

$$Y(n) = W_N(n). \quad (5.55)$$

Полученный случайный процесс $z(\varphi)$ подается на вход математической модели динамики. Таким образом, имитируется работа объекта в режиме реального времени. Выходная координата $y(\varphi)$, полученная по математической модели, подается в блок анализа, в котором исследуется пове-

дение объекта. Негативными признаются следующие результаты имитационного моделирования:

- выходная координата монотонно увеличивается (уменьшается) во времени и выходит за допустимые пределы $y_{\max}$ ($y_{\min}$);
- выходная координата имеет отдельные выбросы, выходящие за пределы $y_{\max}$, $y_{\min}$;
- скорость изменения выходной координаты превышает заданный предел.

Итак, моделирование химических реакторов может осуществляться аналитическими методами и экспериментальными. В первом случае используем классические уравнения физико-химических процессов, материальных и тепловых балансов системы. К экспериментальным, в части вычислительного эксперимента, можно отнести метод имитационного моделирования. Он заключается в постановке численного эксперимента на математической модели с целью оценить различные стратегии, обеспечивающие функционирование исследуемого объекта.

Вопросы самоконтроля

1. Перечислите основные типовые модели потоков ХТС.
2. Основные допущения при выводе модели РИС.
3. Основные допущения при выводе модели РИВ.
4. Какое допущение лежит в основе вывода однопараметрической диффузионной гидродинамической модели?
5. Что учитывается при выводе двухпараметрической диффузионной модели?
6. Допущения, используемы при выводе ячеечной модели.
7. Какой принцип положен в основу вывода комбинированных моделей?
8. Типовые уравнения основных процессов ХТС.
9. Основные типовые режимы, при условии отсутствия фазовых превращений.
10. Отличия уравнений накопления теплоты при составлении теплового баланса для стационарного и нестационарного режимов.
11. Общая характеристика имитационного моделирования.
12. Методы организации генератора случайных чисел.

Литература

1. Батунер Л.М. Математические методы в химической технике. – 6-е изд., исправленное / Л.М. Батунер, М.Е. Позин; под ред. М.Е. Позина. – Л.: Химия, 1971. – 824 с.
2. Гордеев Л.С. Математическое моделирование химико-технологических

систем / Л.С. Гордеев, Е.С. Кадосова, В.В. Марков, Ю.В. Сбоева. - М.: РХТУ им. Д.И.Менделеева, 1999. – Ч.1. Методологические и теоретические основы: Текст лекций. – 48 с.

3. *Дворецкий Д.С.* Компьютерное моделирование биотехнологических процессов и систем / Д.С. Дворецкий, С.И. Дворецкий, Е.И. Муратова, А.А. Ермаков. – Тамбов: ТГТУ, 2005. – 80 с.

4. *Закгейм А.Ю.* Введение в моделирование химико-технологических процессов / А.Ю. Закгейм. – М.: Химии, 1982. – 288 с.

5. *Кафаров В.В.* Математическое моделирование основных процессов химических производств / В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. – М.: Высшая школа, 1991. – 389 с.

6. *Литовка Ю.В.* Получение оптимальных проектных решений и их анализ с использованием математических моделей / Ю.В. Литовка. – Тамбов: ТГТУ, 2006. – 160 с.

7. *Федорова С.А.* Методические указания по дисциплине «Математическое моделирование и применение ЭВМ в химической технологии для студентов заочной формы обучения» / С.А. Федорова. – Севастополь: СИЯЭиП, 2001. – 68 с.

Л е к ц и я № 6

МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ В ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

1. Оптимизация. Критерий оптимальности

Общая постановка задач химико-технологических процессов. Оптимизация в широком смысле слова находит применение в науке, технике и в любой другой области человеческой деятельности.

Понятие об оптимизации возникло давно. Известно, что еще греческими математиками была решена задача об отыскании замкнутой линии заданной длины, ограничивающей максимальную площадь. Это окружность. Подобные задачи впоследствии получили название изопериметрических.

Поиски оптимальных решений привели к созданию специальных математических методов и уже в 18 вв. были заложены математические основы оптимизации (математический аппарат бесконечно малого, вариационное исчисление, численные методы и т.д.). Однако до второй половины 20 вв. методы оптимизации применялись крайне редко, поскольку практическое использование математических методов оптимизации требовало огромной вычислительной работы, которую реализовать без ЭВМ было очень сложно, а в ряде случаев – невозможно.

Особенно большие трудности возникали при решении задач оптимизации процессов в химической технологии. Расчеты процессов и аппаратов химических производств, как правило, связаны с необходимостью выбора лучшего варианта из многих возможных.

Принято считать, что *оптимизация* – это целенаправленная деятельность, заключающаяся в получении наилучших результатов при соответствующих условиях.

Задача оптимизации заключается в определении таких параметров системы или условий осуществления того или иного процесса, при которых достигается максимальное или минимальное (по условиям задачи) численное значение некоторой характерной величины, называемой критерием оптимизации.

Постановка задачи оптимизации предполагает.

1. Наличие объекта оптимизации и выявление цели оптимизации, т.е. формулировки требований, предъявляемых к объекту оптимизации.

При этом формулировка каждой задачи оптимизации должна содержать необходимое требование установления экстремального значения только одной величины.

«Получить максимальный выход продукции при минимальном расходе сырья» - неверно, поскольку минимальный расход продукции равен нулю, ни о каком максимальном выходе продукции здесь нельзя говорить. «Получить максимальный выход продукции при заданном расходе сырья» или «для заданного выхода продукции обеспечить минимальный расход сырья» - верно.

В общем случае объектом оптимизации может считаться любой производственный комплекс: аппарат, агрегат, цех, завод, комбинат, отрасль промышленности.

2. *Наличие ресурсов оптимизации*, под которыми понимают возможность выбора значений некоторых параметров оптимизируемого объекта. Объект должен обладать определенными степенями свободы – управляющими воздействиями, которые позволяют изменять его состояние в соответствии с теми или иными требованиями.

3. *Возможность количественной оценки оптимизируемой величины*, поскольку лишь при выполнении этого условия можно сравнивать эффекты от выбора тех или иных управляющих воздействий.

Оптимальный, или наилучший, вариант работы объекта должен измеряться какой-то количественной мерой – критерием оптимальности.

Критерий оптимальности

Критерием оптимальности – или критерием оптимизации, называется количественная оценка анализируемого качества объекта. Критерий оптимизации должен быть математически сформулирован так, чтобы он отражал существенную сторону процесса, обобщающую качество его функционирования.

На основании выбранного критерия оптимальности составляется так называемая целевая функция, или функция выгоды (функция качества, экономический критерий и т.п.), представляющая собой зависимость критерия оптимальности от параметров, влияющих на его значение.

Вид критерия оптимальности (или целевой функции) определяется конкретным содержанием решаемой задачи оптимизации. В задачах проектирования защиты целевой функцией могут быть масса, габаритные размеры, стоимость, мощность дозы или другие физические или технические параметры, характеризующие конкретный вариант конструкции. В задачах химической технологии критерием оптимальности может служить технологическая характеристика: время пребывания, выход продукта, конечная концентрация, температура и т.д. В результате решения подобных задач определяется оптимальное время пребывания и максимальная концентрация целевого продукта для некоторых типов реакций, устанавливается оптимальный температурный профиль в реакторе вытеснения и т.д.

Например, прохождение химической реакции получения каучука зависит от: скорости подачи основного сырья, его состава, подачи дополнительных ингредиентов, температуры, скорости перемешивания. Эффективность процесса определяется процентом молекул бутадиола стирола, образовавших молекулы полимера. Численные значения этих факторов, которые могут быть установлены в заданных пределах, определяют режим технологического процесса. Тогда задача оптимизации сводится к поиску такого режима, среди множества возможных, которое обеспечит максимальную степень превращения (получения молекул полимера) при заданных условиях.

При постановке конкретных задач оптимизации технологических оценок критерий оптимальности должен быть записан в виде аналитического выражения.

1. Во многих задачах, когда случайное возмущение невозможно математически формализовать (обычно неизвестна ни величина, ни характер их изменения) или они невелики, *воздействия случайных возмущений на объект приходится не учитывать*. Тогда оптимизируемый процесс рассматривается как детерминированный и возмущающие параметры в его математическое описание не включают.

Критерий оптимальности детерминированного процесса в общем виде может быть представлен как функция входных, выходных и управляющих (оптимизируемых) параметров

$$R = R(x_1, x_2, \dots, x_n; y_1, y_2, \dots, y_n; u_1, u_2, \dots, u_n) \quad (6.1)$$

или в векторной форме

$$R = R(X, Y, U). \quad (6.2)$$

Поскольку параметры Y также являются функцией оптимизируемых параметров U , то для фиксированных значений входных величин X критерий оптимальности можно рассматривать как функцию управляющих параметров

$$R = R(U). \quad (6.3)$$

При этом всякое изменение значений управляющих параметров двояко сказывается на величине критерия оптимальности:

- 1) *прямо*, т.е. управляющие параметры непосредственно входят в выражение критерия оптимальности;
- 2) *косвенно* – через изменение входных параметров процесса, которые зависят от управляющих.

В задачах оптимизации детерминированных процессов различают *простые и сложные* критерии оптимальности.

Принято называть критерий оптимальности *простым*, если требуется

определить максимальное или минимальное значение R без заданных условий на какие-либо другие величины.

Такие критерии оптимальности обычно выбираются при постановке частных задач оптимизации в терминах технологических оценок. Например, максимальная концентрация целевого продукта некоторых типов реакций. И, иногда, в общих задачах, если требуется найти производительность или себестоимость целевого продукта без каких-либо условий на величины, определяющие указанные экономические оценки.

Критерий оптимальности называется сложным, если необходимо установить максимальное или минимальное значение R при некоторых условиях, которые накладываются на ряд других величин.

Например, критерий оптимальности в задачах определения максимальной производительности $V_{i, \max}$ по i -му продукту при заданной себестоимости S_i или нахождения минимальной себестоимости $S_{i, \min}$ i -го продукта при заданной производительности V_i .

К *сложным* относятся критерии оптимальности, если их аналитические выражения имеют вид

$$R = R(u_1, u_2), \quad (6.4)$$

где u_1, u_2 - оптимизируемые параметры.

2. Если *случайные возмущения велики и их необходимо учитывать* при математическом описании, т.е. оптимизируемый процесс – стохастический, то применяются экспериментально-статистические методы. Они позволяют получить математическую модель стохастических процессов в виде функции

$$Y_i = \psi_i(X, U). \quad (6.5)$$

Эта модель справедлива только для некоторой локальной области исследуемого пространства функции цели. Такая модель может быть записана в виде уравнения регрессии, при этом управляющие и входные параметры объединены в группу входом и являются факторами

$$Y_i = f_i(X). \quad (6.6)$$

Тогда критерий оптимальности принимает вид

$$R = R(X). \quad (6.7)$$

Локальное действие математической модели стохастических процессов приводит к необходимости использования специальных поисковых методов оптимизации.

Связь между параметрами (6.3) или (6.7) можно установить в результате предварительного изучения свойств оптимизируемого объекта (детерминированного или стохастического), составления математического опи-

сания и получения математической модели в удобном виде. Принципиально можно вместо математической модели использовать сам оптимизируемый объект, на котором опытным путем найти в удобной форме зависимости (6.3) и (6.7).

Процедура оптимизации стохастических процессов принципиально не отличается от таковой для детерминированных процессов. Однако особенность задач оптимизации стохастических процессов состоит в том, что модель (уравнение регрессии) служит лишь основанием поиска оптимума за пределами ее действия.

Различают задачи *статической оптимизации* для процессов, протекающих в установившихся режимах, которые решают вопросы создания и реализации оптимальной модели процесса, и *задачи динамической оптимизации*, или задачи создания и реализации системы оптимального управления процессом при неустоявшихся режимах эксплуатации, для решения которых требуется изучение динамики процесса (например, пуск процесса или перевод его в одного режима в другой при минимальных отклонениях качества продукции, оптимальное управление периодическим процессом).

Как только определены управляющие параметры, т.е. установлено, чем оптимизировать, в большинстве задач оптимизации сразу возникают ограничения на область изменения этих параметров (переменных).

Примеры возможных ограничений. В качестве управляющего воздействия - температура внутри реактора. При этом пределы изменения температуры определяются условиями сохранения активности катализатора: в реакторе окисления этилена температура не может превышать 250 °С, т.к. катализатор спекается и реактор выходит из строя.

По соображениям взрывоопасности соответствующие ограничения могут быть наложены на концентрацию компонентов реакционной смеси: содержание аммиака в воздушно-аммиачных смесях, применяемых в агрегатах получения оксида азота в производстве разбавленной азотной кислоты, ограничивается 10...11 %, т.к. содержание аммиака в воздушно-аммиачной смеси более 12 % может привести к взрыву.

Управляющим параметром при оптимизации процесса в теплообменных аппаратах может быть объемная скорость теплоносителя (газа или жидкости). Величина этого параметра ограничивается мощностью компрессора - или насоса.

Под *ограничениями* также понимают некоторые технологические величины, которые в процессе работы аппарата не должны выходить из предписываемых технологических допусков, по экономическим соображениям.

Ограничения на переменные могут задаваться в различной форме: *числом, процентным соотношением, уравнением, неравенством.*

Главное содержание задач оптимизации заключается в отыскании оп-

тимального (наилучшего) решения, т.е. решения, обеспечивающего максимум (минимум) некоторого критерия эффективности с учетом заданной системы ограничений.

Независимо от вида критерия оптимальности, задача оптимизации сводится к нахождению экстремума (максимума или минимума) целевой функции или критерия оптимальности R . Возможности использования методов дифференциального и вариационного исчисления для решения некоторых типов таких задач, возникающих в геометрии и физике, были известны с середины 18 в. Они относятся к классическим задачам оптимизации. Существует класс задач оптимизации, которые, как правило, не поддаются решению классическими методами. Это так называемые задачи математического программирования.

Существуют различные подходы к классификации методов поиска экстремума. Но, в основу любой классификации должен быть положен определенный критерий или принцип классификации. Для задач математического программирования такой критерий должен быть тесно связан с характером и видом оптимизируемой функций и функций, участвующих в описании ограничений, с характером изменения оптимизируемых переменных $x_1, x_2, \dots, x_n$. В соответствии с различными критериями классификации мы рассмотрим три типа классификации задач математического программирования

1. С точки зрения изменения переменных $x_1, x_2, \dots, x_n$ во времени (или как функции некоторого параметра) различают *статические* и *динамические* задачи математического программирования. К статическим относят задачи математического программирования, в которых поведение системы описывается алгебраическими уравнениями. Если же поведение системы, процессов в системе, описывается дифференциальными или разностными уравнениями, то возникает так называемая динамическая задача математического программирования.

В общем виде статическая задача математического программирования формулируется следующим образом: найти экстремальное значение (максимум или минимум функции $z = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ при наличии условий, которые называются ограничениями, а функция $z = f(x_1, x_2, \dots, x_n)$ - целевой функцией.

$$\left\{ \begin{array}{l} g_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \vdots \\ g_{n-m}(x_1, x_2, \dots, x_n) \leq 0 \\ \vdots \\ g_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ x_1 \geq 0, x_2 \geq 0, \dots, x_n \geq 0, m \leq n \end{array} \right. . \quad (6.8)$$

В динамической задаче математического программирования требуется отыскать в n -мерном пространстве траекторию, удовлетворяющую наложенным ограничениям (в том числе и краевым условиям), при движении вдоль которой достигается экстремум функционала. Раздел математического программирования, в котором изучаются динамические задачи, называют «динамическим программированием». Однако этот последний термин относится не только к типу задач, но и к методу. Метод же динамического программирования может быть применен не только к динамическим задачам, но и к очень большому кругу других задач.

2. В соответствии с тем, учитываются или не учитываются в системе случайные воздействия, задачи математического программирования делятся на *стохастические* (отсюда термин «стохастическое программирование») и *детерминированные*. В ряде случаев неучет вероятностной природы явлений, возникающих в исследуемой системе, может привести к существенным погрешностям в конечных результатах решения задачи математического программирования. Наиболее простой вариант стохастической задачи возникает в том случае, когда в статической задаче целевая функция f и функции g являются линейными функциями параметров x_i , (задача линейного программирования) со случайными коэффициентами и оптимизация осуществляется по средним (в смысле математического ожидания) значениям x_i .

3. По виду функций, описывающих ограничения и виду целевой функции статические задачи математического программирования делятся на *линейные* и *нелинейные*.

В случае, когда целевая функция имеет линейный вид, а ограничения на независимые переменные имеют вид линейных равенств или неравенств, то задача оптимизации в таком случае к задаче линейного программирования. Если вид целевой функции нелинейный или ограничения на независимые переменные имеют нелинейный вид, то мы имеем задачу нелинейного программирования.

Первое решение задач линейного программирования было дано в 1939 г. академиком Л.В. Канторовичем, и было переоткрыто в 1947 г. в США Дж. Данцигом. Разработанный Дж. Данцигом для решения задачи линейного программирования симплекс-метод получил широкое распространение. Применяется не только для решения задачи линейного программирования, и в качестве составной части методов решения ряда нелинейных задач.

Задачи нелинейного программирования представляют собой очень широкий класс. Для некоторых типов задач нелинейного программирования разработаны численные методы решения. Это, прежде всего, классические задачи, которые характеризуются:

- отсутствием ограничений в виде неравенств;
- отсутствием условий неотрицательности и целочисленности переменных;

- непрерывностью и дифференцируемостью (по меньшей мере, дважды) функций цели и ограничений.

Среди задач, нелинейного программирования большой интерес представляют задачи, в которых любой локальный экстремум является одновременно глобальным.

Таким образом, при решении задачи оптимизации необходимо:

1. Составить математическую модель объекта оптимизации. Принципиально можно вместо математической модели использовать сам оптимизируемый объект, на котором опытным путем найти в удобной форме зависимости (6.3) и (6.7).

Наличие математической модели процесса, который позволяет, не затрагивая по существу сам процесс, определить, какое решение нужно принять, чтобы улучшить его режим, является важным условием при решении задачи оптимизации.

2. Выбрать критерий оптимальности и сформировать функцию цели (целевая функция может быть как без ограничений, так и с ограничениями на значения отдельных параметров).

3. Установить возможные ограничения, которые должны накладываться на переменные.

4. Выбрать метод оптимизации, который позволит найти экстремальные значения искомых величин.

Удачно выбранный метод оптимизации должен привести к конечным результатам с наименьшими затратами на вычисления или же к получению наибольшего объема информации об искомом решении.

Поэтому большая часть методов решения оптимальных задач основана на предположении, что математическая модель оптимизируемого объекта известна

Пример. Оптимизация реактора идеального вытеснения. Найти максимально возможный выход изопропана, получаемого изомеризацией бутана, подаваемого с начальной концентрацией 8 моль/л в реактор идеального вытеснения, в котором происходят следующие реакции:



с константами скоростей, равными $k_1 = 1,48 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$, $k_2 = 1,7 \cdot 10^{-4} \text{ с}^{-1}$ соответственно.

Пользуясь моделью реактора идеального вытеснения и уравнением для скорости последовательной реакции вида $A \xrightarrow{k_1} S \xrightarrow{k_2} B$ по продукту S, зададим расчетную зависимость для $C_s(\tau)$.

Критерий оптимальности $R = C_s(\tau)$, поэтому аналитическое выражение функции для случая реактора вытеснения будет:

$$R = C_s(\tau) = \frac{k_1}{k_1 - k_2} C_{AO} (e^{-k_1\tau} - e^{-k_2\tau}). \quad (6.9)$$

Для определения τ_{opt} производную $\frac{dR}{d\tau}$ приравняем нулю, то есть:

$$\frac{dR}{d\tau} = \frac{k_1}{k_1 - k_2} C_{AO} (-k_1 e^{-k_1\tau} + k_2 e^{-k_2\tau}) = 0. \quad (6.10)$$

Решение уравнения (2) имеет вид

$$\tau_{opt} = \frac{\ln \frac{k_2}{k_1}}{k_2 - k_1}. \quad (6.11)$$

Если $k_2 = k_1$, то формула (6.11) непригодна для вычислений, так как возникает неопределенность типа $\frac{0}{0}$. Значение оптимального времени пребывания можно найти при переходе к пределу, когда $k_2 \rightarrow k_1$. Обозначив $\frac{k_2}{k_1} = z$, формулу (6.11) перепишем так

$$\tau_{opt} = \frac{\ln z}{k_1(z-1)}. \quad (6.12)$$

Неопределенность типа $\frac{0}{0}$ следует раскрыть по правилу Лопиталя

$$\tau_{opt}|_{k_1=k_2} = \lim_{z \rightarrow 1} \frac{(\ln z)'}{(k_1 z - k_1)'} = \frac{1}{k_1}. \quad (6.13)$$

Значение максимально возможного выхода продукта S в изотермическом реакторе идеального вытеснения

$$R_{max} = R_{max} = C_{A_0} \left(\frac{k_1}{k_2} \right)^{\frac{k_2}{k_2 - k_1}}. \quad (6.14)$$

Подставим в формулу (6.14) заданные в условии значения

$$R_{max} = C_{S_{max}} = 8 \left(\frac{1.48 * 10^{-4}}{1.7 * 10^{-4}} \right)^{\frac{1.7 * 10^{-4}}{(1.7 * 10^{-4} - 1.48 * 10^{-4})}} = 2.74.$$

Ответ. Значения оптимального времени пребывания и максимальной концентрации целевого продукта S для реактора идеального вытеснения

вычисляются, если известны константы скоростей реакции k_1 и k_2 при заданной концентрации исходного вещества C_{A_0} . Максимально возможный выход изопропана при заданных условиях составляет 2,74 моль/л.

Таким образом, задача оптимизации сводится к нахождению экстремума (максимума или минимума) целевой функции или критерия оптимальности R . Достижение экстремального значения критерия оптимальности Q обеспечивается надлежащим выбором так называемых оптимизирующих переменных x (параметры системы или режимные условия) или управляющих воздействий.

2. Методы поиска экстремума (оптимизации)

Выбор того или иного метода решения экстремальных задач исследования операций зависит в основном от следующих факторов:

- от принадлежности задачи исследования операций к тому или иному классу;
- от способа задания критерия оптимизации, от линейности или нелинейности математической модели решаемой задачи, от времени и средств, имеющихся в распоряжении ответственного за выработку оптимальных решений;
- от личных склонностей и уровня подготовки вырабатывающего оптимальное решение;
- от качества и количества информации об объекте.

Ниже рассмотрим некоторые методы поиска экстремума (оптимизации), объединенные в следующие группы:

- классические методы:
 - метод прямого перебора;
 - классический метод дифференциального исчисления;
 - метод множителей Лагранжа;
- методы поиска экстремума унимодальных функций:
 - метод половинного деления (дихотомии);
 - метод чисел Фибоначчи;
 - метод золотого сечения;
- регулярные (детерминированные) методы оптимизации:
 - метод покоординатного спуска (подъема);
 - метод градиента;
 - метод наискорейшего спуска;
- методы случайного спуска:
 - ненаправленный случайный поиск (метод Монте-Карло);
 - направленный поиск без самообучения;
 - направленный случайный поиск с самообучением.

2.1. Классические методы

Метод прямого перебора

Если известна функциональная связь целевой функции Y и искомой переменной X , то можно последовательно вычислить значения целевой функции для некоторых значений искомой переменной. Вычисления повторяются до тех пор, пока не будет найден $\min$ или $\max$ значения целевой функции.

Этот метод может быть использован для решения задач исследования операций, если имеется одна искомая переменная или несколько с небольшим диапазоном изменения искомых переменных.

Особенность и преимущества метода прямого перебора заключаются:

- в независимости поиска от вида и характера целевой функции;
- цикличности поисковой процедуры;
- определении глобального экстремума целевой функции;
- простоте алгоритма и программы оптимизации;
- малом объеме машинной памяти.

Главным *недостатком* метода является продолжительное время работы. В случае искомой переменной и наличии более чем одного экстремума исследуемой функции использование этого метода неэффективно.

Классический метод дифференциального исчисления

Если известна функциональная связь целевой функции с искомыми переменными, которая обладает непрерывными первыми частными производными, то, определив частные производные по своим искомым переменным, приравняв частные производные от Y по нулю, решаем совместно систему уравнений.

Существует ряд трудностей при его реализации и *ограничения по применению*:

- при большом числе оптимизируемых параметров метод становится весьма сложным в части решения системы уравнений;
- условие определения экстремума, выраженное системой уравнений, является необходимым, но не достаточным. Определяется положение стационарных точек внутри области, среди которых, кроме экстремальных, могут находиться особые точки типа «седла». Учет достаточных условий нахождения экстремумов функций многих переменных является сложным как в алгоритмическом, так и в вычислительном плане;
- рассматриваемый метод дает возможность найти экстремум только в том случае, если он лежит внутри, а не на границе области возможных значений переменных, следовательно, требуется дополнительный анализ значений функции на границах допустимой области изменения параметров;

- оптимизируемая функция должна быть непрерывной и иметь первые и вторые производные по оптимизируемым параметрам;
- необходимо, чтобы оптимизируемые параметры, определяющие значения минимума или максимума функции, были независимы, т.е. не должно быть дополнительных уравнений, связывающих между собой часть параметров.

Метод множителей Лагранжа

При решении класса задач, которые могут быть представлены как задачи отыскания экстремума соответствующего критерия оптимальности при условии, что на независимые переменные наложены определенные ограничения, имеющие вид равенств в классическом анализе разработан и используется метод множителей Лагранжа, сводящий задачу с ограничениями к обычной экстремальной задаче без ограничений.

С помощью этого метода можно определить экстремальные точки функции многих переменных при наличии дополнительных связей между оптимизируемыми параметрами.

Пусть имеется целевая функция, экстремум которой требуется найти, причем существуют дополнительные условия. Введя p дополнительных множителей построим новую функцию.

Необходимые условия состоят в равенстве нулю всех первых частных производных.

$$\frac{\partial r_1(v^{(1)})}{\partial v_k^{(1)}} = \frac{\partial r_2(v^{(2)})}{\partial v_k^{(2)}} = \dots = \frac{\partial r_N(v^{(N)})}{\partial v_k^{(N)}} \quad k=1, \dots, m \quad (6.15)$$

В результате получается система уравнений с неизвестными, решение этих уравнений относительно переменных дает возможность определить положение стационарной точки. Использование вспомогательной функции позволяет заменить задачу с дополнительными условиями задачей без них.

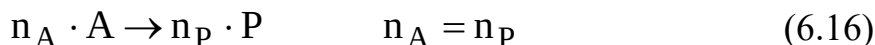
Недостатком множителей Лагранжа является введение дополнительных переменных, которые должны быть исключены с помощью дополнительных уравнений. Кроме того, для этого метода сохраняют свою силу недостатки и трудности классического метода дифференциального исчисления.

Принципиальным недостатком метода множителей Лагранжа является невозможность решения с его помощью задач, имеющих ограничения в форме неравенств. Нелинейное программирование как новая математическая дисциплина возникла главным образом в связи с указанной ограниченностью метода множителей Лагранжа.

В качестве примера применения метода множителей Лагранжа в хи-

мической технологии рассмотрим пример распределения сырья в реакторе.

Пример. Поток сырья А, поступающего в производство в количестве, распределяется на N параллельно работающих реакторов идеального смешения. В них протекает химическая реакция



скорость которой описывается выражением

$$v_A = -n_A \cdot k \cdot x_A^{n_A}. \quad (6.17)$$

Предполагается, что объемы реакторов $v_r^{(i)}$ могут различаться между собой и, кроме того, по каким-либо причинам, например неодинаковой активности катализатора в аппаратах, разных температурных условиях и т.п., константы скорости реакции в различных реакторах также могут быть неодинаковы.

Для заданного значения требуется найти оптимальный режим распределения сырья по всем реакторам, при котором достигается максимальное превращение исходного продукта.

Р е ш е н и е

Критерий r_i , характеризующий эффективность работы i-го реактора, в данном случае определяется выражением

$$r_i = v^{(i)} \cdot x_A^{(i)}, \quad (6.18)$$

где $v^{(i)}$ - нагрузка на i-й реактор по исходному сырью;

$x_A^{(i)}$ - концентрация продукта А на выходе i-го реактора.

Следовательно, величина численно равна количеству непрореагировавшего вещества А на выходе аппарата, и критерий оптимальности всей системы параллельно работающих реакторов может быть записан в виде

$$R = \sum_{i=1}^N v^{(i)} \cdot x_A^{(i)}. \quad (6.19)$$

Минимальное значение критерия оптимальности (6.19) нужно находить при условии

$$V = \sum_{i=1}^N v^{(i)} = 0. \quad (6.20)$$

Для того чтобы получить систему уравнений (6.18), найдем выраже-

ние для производной $\frac{\partial r_1}{\partial v^{(i)}}$. Поскольку, с одной стороны, величина $x_A^{(i)}$ является функцией нагрузки на реактор, в результате дифференцирования выражения (4) по $v^{(i)}$ получим

$$\frac{\partial r_1}{\partial v^{(i)}} = x_A^{(i)} + v^{(i)} \cdot \frac{\partial x_A^{(i)}}{\partial v^{(i)}}. \quad (6.21)$$

С другой стороны, концентрацию исходного продукта реакции на выходе i -го реактора можно $x_A^{(i)}$ определить из уравнения материального баланса аппарата по этому компоненту

$$v^{(i)} \cdot (x_A^{(0)} - x_A^{(i)}) - V_r^{(i)} \cdot n_A \cdot k^{(i)} \cdot (x_A^{(i)})^{n_A} = 0, \quad (6.22)$$

где $x_A^{(0)}$ - концентрация реагента А в исходном сырье.

Производная может быть найдена из выражения (6.22) как производная $\frac{dx_A^{(i)}}{dv}$ неявной функции, для чего следует продифференцировать это выражение по $v^{(i)}$. В результате получим уравнение

$$x_A^{(0)} - x_A^{(i)} - v^{(i)} \cdot \frac{dx_A^{(i)}}{dv^{(i)}} - n_A^2 \cdot V_r^{(i)} \cdot k^{(i)} \cdot (x_A^{(i)})^{n_A - 1} \cdot \frac{\partial x_A^{(i)}}{\partial v^{(i)}} = 0 \quad (6.23)$$

из которого находим

$$\frac{\partial x_A^{(i)}}{\partial v^{(i)}} = \frac{1}{v^{(i)}} \cdot \frac{x_A^{(0)} - x_A^{(i)}}{1 + n_A \cdot \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_A^{(i)}} - 1 \right)}. \quad (6.24)$$

Подставляя уравнение (6.24) в соотношение (6.21), получим

$$\frac{\partial r_i}{\partial v^{(i)}} = \frac{(n_A + 1) \cdot x_A^{(0)} - n_A \cdot x_A^{(i)}}{1 + n_A \cdot \left(\frac{x_A^{(0)}}{x_A^{(i)}} - 1 \right)}. \quad (6.25)$$

Таким образом найдено, что производная $\frac{\partial r_i}{\partial v^{(i)}}$ выражается только через концентрацию исходного продукта реакции на выходе реактора $x_A^{(i)}$

и стехиометрические характеристики реакции (6.16) и не зависит от остальных параметров реактора. Отсюда с учетом условия (6.18) сразу следует, что при оптимальном распределении потока исходного сырья по всем реакторам концентрации $x_A^{(i)}$ на выходе всех аппаратов должны быть равны между собой, т.е. должно выполняться условие

$$x_A^{(1)} = x_A^{(2)} = \dots = x_A^{(N)}. \quad (6.26)$$

Из условия (6.24) и материальных балансов реакторов (6.22) теперь может быть получено соотношение

$$\frac{V_r^{(1)} \cdot k^{(1)}}{v^{(1)}} = \frac{V_r^{(2)} \cdot k^{(2)}}{v^{(2)}} = \dots = \frac{V_r^{(i)} \cdot k^{(i)}}{v^{(i)}} = \dots = \frac{V_r^{(N)} \cdot k^{(N)}}{v^{(N)}} \quad (6.27)$$

откуда

$$v^{(i)} = v^{(1)} \cdot \frac{V_r^{(i)} \cdot k^{(i)}}{V_r^{(1)} k^{(1)}}. \quad (6.28)$$

Комбинируя выражение (6.28) и условие (6.20), находим формулу

$$v^{(1)} = \frac{V_r^{(1)} \cdot k^{(1)}}{\sum_{i=1}^N V_r^{(i)} k^{(i)}} \cdot V \quad (6.29)$$

при подстановке которой в соотношение (6.28) получим

$$v^{(i)} = \frac{V_r^{(i)} \cdot k^{(i)}}{\sum_{p=1}^N V_r^{(p)} k^{(p)}} \cdot V. \quad (6.30)$$

Выражение (6.30) определяет решение поставленной оптимальной задачи, если известны объемы всех реакторов и значения констант скорости реакции во всех аппаратах. В частном случае, когда объемы всех реакторов равны между собой

$$V_r^{(1)} = V_r^{(2)} = \dots = V_r^{(N)} \quad (6.31)$$

и условия реакции во всех аппаратах одинаковы, т.е.

$$k^{(1)} = k^{(2)} = \dots = k^{(N)} \quad (6.32)$$

формула (6.30) существенно упрощается:

$$v^{(i)} = \frac{1}{N} \cdot V. \quad (6.33)$$

Выражение (6.33) означает, что при оптимальном распределении нагрузки на все реакторы должны быть одинаковы.

С помощью соотношения (6.26) можно построить систему регулирования, обеспечивающую автоматическое поддержание оптимального распределения нагрузки независимо от условий осуществления реакции в отдельных аппаратах.

2.2. Методы поиска экстремума унимодальных функций

Функция одной переменной, имеющая в интервале исследования один горб (впадину), называется *унимодальной*.

Унимодальная функция не обязательно должна быть гладкой и даже непрерывной, разрывной и даже может в некоторых точках интервала быть неопределенной. Предположение унимодальности не связано с жесткими ограничениями и выполняется во многих практических задачах поиска оптимума. Предыдущие методы нельзя применять к функциям с изломами и к разрывным функциям.

Если целевая функция унимодальна, то можно сузить интервал исследования функции на оптимум путем определения значений целевой функции в двух точках интервала задания функции и последующего поинтервального сравнения.

Как правило, задачи исследования операций имеют унимодальную целевую функцию. Последовательно сужая интервал исследования, в котором находится оптимальное значение искомой управляющей переменной, можно с достаточной степенью точности найти оптимальное значение искомой переменной. Для этого необходимо выработать такую стратегию поиска, чтобы за заданное число шагов (этапов) определить минимальный интервал, в котором лежит искомый оптимум, или свести исходный интервал до области заданной длины за минимальное число шагов (расчетов).

К *последовательным детерминированным методам* поиска экстремума унимодальных функций (учитывающим результаты предыдущих шагов) относятся методы дихотомии, Фибоначчи и золотого сечения.

Метод дихотомии (половинного деления)

В некоторых источниках [15] метод половинного деления отличают от метода дихотомии в выборе интервала. Мы будем придерживаться общепринятого подхода [5, 13, 14]. Название метода объясняется тем, что на каждом следующем шаге описанного алгоритма отрезок, содержащий точку минимума, становится примерно вдвое короче. Искомая длина интерва-

ла исследования, в котором лежит искомый оптимум, уменьшается с каждым шагом N почти в два раза.

Алгоритм метода состоит из следующих этапов:

- делят исходный интервал исследования пополам;
- вблизи точки деления (по разные ее стороны) подсчитывается дважды значение целевой функции $f(x_1)$, $f(x_n)$, где $(x_n - x_1)$ - наименьший интервал изменения управляющей переменной, при котором становится возможным обнаружить отличие между $f(x_1)$ и $f(x_n)$;

- используя свойство унимодальных функций, определяют интервал, в котором находится экстремальное значение целевой функции, затем процесс расчета повторяется по аналогичной схеме до тех пор, пока не будет найден оптимум.

Алгоритм метода. Пусть требуется найти минимум унимодальной функции $f(x)$ на отрезке $[a, b]$ и указать точку x^* , в которой он достигается.

$$f^* = \min_{a \leq x \leq b} f(x). \quad (6.34)$$

1. Отрезок $[a, b]$ делят пополам

$$\bar{x}_1 = \frac{a+b}{2}. \quad (6.35)$$

2. Вблизи его середины $\bar{x}_1$ вычисляют значения функции $f(x)$ в двух точках

$$x_1 = \bar{x}_1 - \frac{\varepsilon}{2} \quad \text{и} \quad x_2 = \bar{x}_1 + \frac{\varepsilon}{2}, \quad (6.36)$$

где число $\varepsilon > 0$, достаточно мало.

3. Вычисляют значения $f(x_1)$ и $f(x_2)$.

4. Сравнивают значения $f(x_1)$ и $f(x_2)$. Для дальнейших расчетов выбирают тот интервал, который заведомо содержит точку x^* .

Так, если $f(x_1) \leq f(x_2)$, это будет отрезок $[a, x_2]$, в противном случае - отрезок $[x_1, b]$.

5. Повторяют п.п. 2 - 4.

То есть, выбранный отрезок вновь делят пополам, вблизи его середины $\bar{x}_2$ берут две точки $x_3 = \bar{x}_2 - \frac{\varepsilon}{2}$ и $x_4 = \bar{x}_2 + \frac{\varepsilon}{2}$, сравнивают в них значения функции и т.д. В результате возникает последовательность срединных точек $\{x_n\}$, для которой

$$|\bar{x}_n - x^*| \leq \frac{(b-a-\varepsilon)}{2^n} + \frac{\varepsilon}{2}, \quad n=1,2,\dots,m. \quad (6.37)$$

За приближения к f_* принимают значения $f(\bar{x}_n)$ при достаточно больших n .

В отличие от метода прямого перебора, в котором эффективность поиска прямо пропорциональна числу расчетов, в методе дихотомии эффективность возрастает с ростом N экспоненциально. Так, если для определения оптимального значения искомой переменной методом прямого перебора требуется около 1000 вычислений, то методом дихотомии - 20. Однако, в классе унимодальных функций метод половинного деления не является наилучшим. Существуют более эффективные методы, позволяющие при том же количестве вычислений значений функции достигнуть лучшей точности, например, метод Фибоначчи.

Метод Фибоначчи

Как ни эффективен метод дихотомии, существует еще более совершенный. В методе Фибоначчи точка деления интервала исследования определяется с каждым новым расчетом (в методе дихотомии необходимо на каждом шаге выполнять два расчета). В интервал исследования попадает предыдущий расчет, и для продолжения поиска достаточно лишь произвести расчет симметрично имеющемуся.

Пусть задано число расчетов (шагов) N . Необходимо их так произвести, чтобы интервал, в котором лежит оптимум, был минимальным. Для этих целей наиболее подходят числа Фибоначчи (1; 2; 3; 5; 8; 13; 21)

$$F_k = k_{k-1} + k_{k-2} \quad F_0 = F_1 = 1.$$

Алгоритм поиска, использующий числа Фибоначчи (поиск минимума).

1. По заданной точности Δ , с которой необходимо найти положение экстремума функции $R(x)$ в интервале $[a, b]$, рассчитывается вспомогательное число N

$$N = \frac{b-a}{\Delta}. \quad (6.38)$$

2. Для получения значения N находится такое число Фибоначчи F_s , чтобы выполнялось неравенство

$$F_{s-1} < N < F_s. \quad (6.39)$$

3. Определяется минимальный шаг поиска по формуле

$$\Delta_m = \frac{b-a}{F_s}. \quad (6.40)$$

4. Рассчитывается значение функции $R(x)$ в начале интервала, т.е. $R(a)$.

5. Следующая точка, в которой вычисляется значение $R(x)$, находится по формуле

$$x^{(1)} = a + \Delta_m F_{s-2} \quad (6.41)$$

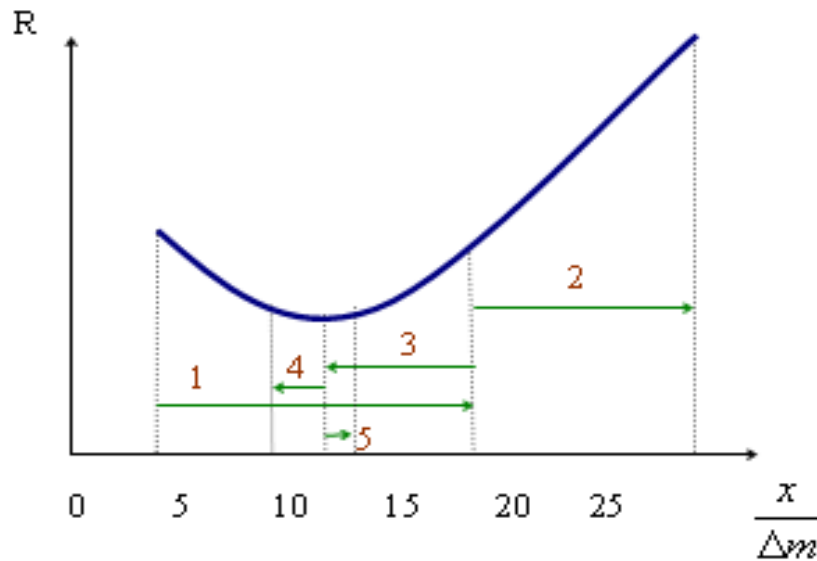


Рис. 6.1. Метод чисел Фибоначчи

6. Если этот шаг оказался удачным, т.е. $R(x^{(1)}) < R(a)$, то следующая точка определяется как

$$x^{(2)} = x^{(1)} + \Delta_m F_{s-3}. \quad (6.42)$$

При $R(x^{(1)}) > R(a)$ (шаг неудачный)

$$x^{(2)} = x^{(1)} - \Delta_m F_{s-3}. \quad (6.43)$$

7. Последующие шаги выполняются с уменьшающейся величиной шага, которая для i -го шага будет равна

$$\Delta x^{(i)} = \pm \Delta_m F_{s-i-2}. \quad (6.44)$$

Указанный процесс продолжается до тех пор, пока не будут исчерпаны все числа Фибоначчи в убывающей последовательности: $F_{s-1-2} = F_{s-i} - F_{s-i-1}$.

Если сравнивать результаты расчета, полученные с помощью методов дихотомии и Фибоначчи, то легко заметить, что для поиска оптимума в методе дихотомии потребовалось выполнить число итераций $N = 13$ с двойным счетом, а при использовании метода Фибоначчи - только с $N = 21$ с одинарным на каждой итерации.

Метод золотого сечения

Метод Фибоначчи требует дополнительных расчетов, так как заранее неизвестно число предполагаемых вычислений. Однако существует еще один метод, который совершенно не зависит от числа готовящихся вычис-

лений и почти столь же эффективен, как метод Фибоначчи. Правило - каждый раз ставить точку расчета симметрично на расстоянии, равном от концов интервала исследования.

Деление интервала на неравные части позволяет найти еще более эффективный метод. Вычислим функцию на концах отрезка $[a, b]$ и положим $a = x_1$, $b = x_2$. Вычислим также функцию в двух внутренних точках x_3 , x_4 . Сравним все четыре значения функции и выберем среди них наименьшее. Пусть, например, наименьшим оказалось $f(x_3)$. Очевидно, минимум находится в одном из прилегающих к нему отрезков. Поэтому отрезок $[x_4, b]$ можно отбросить и оставить отрезок $[a, x_4]$.

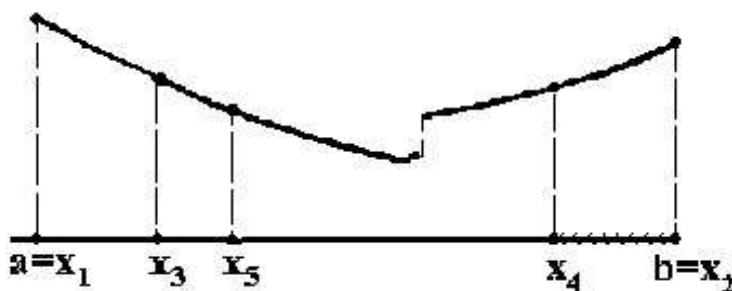


Рис. 6.2. Метод золотого сечения

На отрезке $[a, x_4]$ снова надо выбрать две внутренние точки, вычислив в них и на концах значения функции и сделать следующий шаг. Но на предыдущем шаге вычислений мы уже нашли функцию на концах нового отрезка $[a, x_4]$ и в одной его внутренней точке x_4 . Потому достаточно выбрать внутри $[a, x_4]$ еще одну точку x_5 определить в ней значение функции и провести необходимые сравнения. Это вчетверо уменьшает объем вычислений на одном шаге процесса.

Каждый раз оставшийся отрезок делится на три части и затем отбрасывается один из крайних отрезков.

Обозначим первоначальный интервал неопределенности через D .

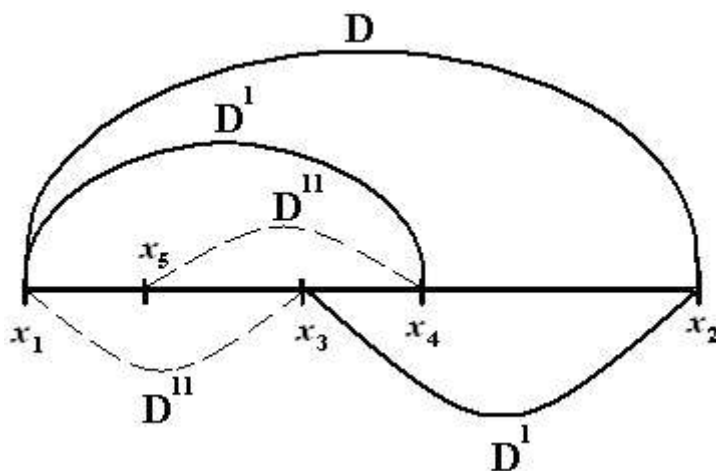


Рис. 6.3. Определение «золотого сечения»

Так как в общем случае может быть отброшен любой из отрезков X_1, X_3 или X_4, X_2 то выберем точки X_3 и X_4 так, чтобы длины этих отрезков были одинаковы

$$x_3 - x_1 = x_4 - x_2. \quad (6.45)$$

После отбрасывания получится новый интервал неопределенности длины D' . Обозначим отношение D/D' буквой φ

$$\varphi = D/D'. \quad (6.46)$$

Далее продолжим процесс аналогично. Для этого интервал D' разделим *подобно* интервалу D , то есть положим

$$\frac{D'}{D''} = \frac{D}{D'} = \varphi, \quad (6.47)$$

где D'' - следующий интервал неопределенности. Но D'' по длине равен отрезку, отброшенному на предыдущем этапе, то есть

$$D'' = D - D'. \quad (6.48)$$

Поэтому получим

$$\frac{D}{D'} = \frac{D'}{D - D'} \Rightarrow \frac{D'}{D} = \frac{D}{D'} - 1. \quad (6.49)$$

Это приводит к уравнению

$$\frac{1}{\varphi} = \varphi - 1 \quad (6.50)$$

или, что тоже

$$\varphi^2 - \varphi - 1 = 0.$$

Положительный корень этого уравнения дает

$$\varphi = \frac{\sqrt{5} + 1}{2} \approx 1,6180. \quad (6.51)$$

То есть, примерно в 1,62 раза меньшая часть меньше большей части. Или меньшая часть составляет примерно 38 %, а большая часть – 62 % длины исследуемого интервала.

В качества сравнения преимуществ и недостатков метода Фибоначчи над остальными методами прямого поиска приведем табл. 1.6. Как видно из таблицы совсем не эффективен метод оптимального пассивного поиска.

Метод Фибоначчи по эффективности превосходит метод деления пополам и почти одинаков с методом золотого сечения.

Т а б л и ц а 1.6

**Сравнительная характеристика методов по длине отрезка локализации
и оценке погрешности**

Метод поиска	Длина отрезка локализации	Величина гарантированной оценки погрешности
Оптимальный пассивный поиск	$\frac{2}{N+1} \Delta$	$\frac{1}{N+1} \Delta$
Метод деления отрезка пополам (N – четное, величиной Δ пренебрегаем)	$\frac{1}{2^{N/2}} \Delta \approx (0,71)^N \Delta$	$\approx 0,5(0,71)^N \Delta$
Метод Фибоначчи	$\frac{2}{F_{N+1}} \Delta \approx 1,7(0,62)^N \Delta$	$\approx 0,85(0,62)^N \Delta$

Эффективность методов, также характеризуется числом итераций, при которой необходимо достичь определенной точности ϵ . Сравнить эффективность метода Фибоначчи с другими методами по этому критерию можно по таблице 1.7.

Т а б л и ц а 1.7

**Сравнительная характеристика методов по количеству итераций
для достижения определенного ϵ**

Метод прямого поиска	Число N при заданном ϵ				
	$\epsilon = 10^{-1}$	$\epsilon = 10^{-2}$	$\epsilon = 10^{-3}$	$\epsilon = 10^{-4}$	$\epsilon = 10^{-5}$
Оптимальный пассивный поиск	9	99	999	9999	99999
Метод деления отрезка пополам	6	12	18	26	32
Метод Фибоначчи	5	10	15	19	24
Метод золотого сечения	5	10	15	20	24

Как видим из приведенных характеристик, метод Фибоначчи является по большинству описанных критериев предпочтительным методом при решении задач, связанных с нахождением экстремумов функции на заданном интервале.

Регулярные методы оптимизации

Метод направленного поиска

Под *регулярными (детерминированными)* методами оптимизации подразумевается такая направленная система действий, которая строго предопределяется сложившейся ситуацией. В настоящее время существует много методов регулярной оптимизации. Характерной чертой их является использование в процессе решения задачи результатов каждого дан-

ного шага (иногда также и предыдущих шагов) поиска оптимальной точки для определения направления изменения оптимизирующих параметров на каждом следующем шаге. При этом значение целевой функции систематически уменьшается (увеличивается).

Существует и так называемое *стохастическое программирование*. Задачи стохастического программирования - это задачи математического программирования, в которых необходимо учитывать воздействие тех или иных случайных факторов. В данном случае уже не имеет смысла поиск экстремума целевой функции, так как это теперь случайная величина.

Поэтому в данной лекции стохастическое программирование мы не рассматриваем. (Обычно на практике в качестве целевой функции выбирают математическое ожидание целевой функции.)

Метод поочередного изменения параметров (метод покоординатного спуска, подъема, метод Гаусса-Зейделя)

Суть его в поочередной оптимизации последовательно по каждому управляющему параметру. Сначала оптимизация производится по одному параметру, затем переходят ко второму и так далее, пока значения целевой функции не перестанут уменьшаться (возрастать).

Недостатки:

- обеспечивает получение только локального оптимума и локальной точки типа седла;
- позволяет оптимизировать только непрерывно изменяющиеся параметры;
- результаты поиска существенно зависят от удачного выбора первого направления движения, начальной точки;
- эффективность метода существенно снижается при наличии ограничений.

Метод градиента

Метод градиента - один из самых распространенных регулярных методов поиска. Процесс оптимизации по методу градиента заключается в определении направления наибольшего изменения целевой функции и некотором перемещении по этому направлению. Направление наибольшего изменения функции определяется направлением градиента оптимизируемой функции.

Для нахождения составляющих градиента необходимо вычислить частные производные целевой функции по оптимизируемым параметрам. Градиент функции, вычисленный в точке, характеризует направление быстрого возрастания функции, а антиградиент - направление быстрого убывания. Градиент всегда перпендикулярен к поверхности равных значений целевой функции.

Для определения оптимума необходимо при минимизации целевой функции для каждой точки поиска N определить градиент и сделать шаг по направлению антиградиента (т.е. в направлении обратном градиентному).

Использование градиентного метода удобно при практическом определении численных значений ряда параметров $x_1, x_2, \dots, x_n$, которые обеспечивают достижение экстремума функции $Q(x_1, x_2, \dots, x_n)$. Таким образом, метод удобен для решения статических задач оптимизации. Можно видеть, что применимость этого метода зависит от свойств функции Q : обычно предполагается, что функция непрерывно дифференцируема во всей области изменения x .

При постановке задачи выявления экстремума функции целесообразно изменять оптимизирующие переменные от первоначально заданных (и, по-видимому, неоптимальных) значений в направлении наиболее быстрого роста этой функции (поиск максимума) или наиболее быстрого ее убывания (поиск минимума). Практически это означает необходимость движения по градиенту (или антиградиенту, т.е. в противоположном направлении).

Вычислительная процедура движения по градиенту может быть организована как дискретная, так и непрерывная. В первом случае вместо частных производных используется их конечно-разностная аппроксимация, а приращение функции, получаемое при заданном малом, но конечном приращении соответствует оптимизирующей переменной, определяется при двукратном вычислении функции. Если функция Q зависит от k переменных, то для определения ее градиента в заданной точке необходимо провести $(k+1)$ вычисление значения функции.

При непрерывной реализации движения направление выбирается исходя из аналитических выражений производных функций, численные значения которых в текущей точке определяются подстановкой соответствующих значений оптимизирующих переменных.

В любом случае экстремум достигается при получении нулевого (или, по крайней мере, весьма малого) значения градиента. Это условие выполняется, когда все частные производные обращаются в нуль.

Следует, однако, отметить, что это условие является необходимым, но не достаточным, и, чтобы убедиться в достижении именно экстремума, а не точки перегиба, требуется проверить вторые производные на равенство нулю, причем при $Q''(x) > 0$ имеем минимум, при $Q''(x) < 0$ максимум, если $Q''(x) = 0$, то наличие экстремума определяется по ближайшей не равной нулю старшей производной, которая должна быть четной по порядку.

Выбор того или иного значения зависит от априорных представлений о форме гиперповерхностей равного уровня целевой функции. Существенное ускорение шага может быть достигнуто в случае использования комбинированного способа: шаг принимается постоянным и достаточно большим при движении вдали от оптимума, а после входа в зону оптимума предусматривается возможность уменьшения шага в 2, 4, ... раз.

Недостатки:

- необходимо перед каждым рабочим шагом производить довольно сложный предварительный анализ;
- при наличии ограничений применение метода затрудняется;
- необходимо определять частные производные целевой функции по оптимизируемым параметрам;
- невысокая скорость достижения оптимума;
- трудности в достижении конечной точки (оптимума);
- большая чувствительность к масштабным преобразованиям.

Преимущество - точность, так как на каждом рабочем шаге производится попытка двигаться в наилучшем направлении.

Метод наискорейшего спуска (подъема)

Это разновидность метода градиента, обеспечивающая наименьшее число шагов в определении оптимума. Суть его сводится к следующему. После определения градиента функции делается шаг в направлении, обратном градиенту. Если значение целевой функции при этом уменьшилось по сравнению с исходным, то делается очередной рабочий шаг в том же направлении, а не определяется заново градиент, как при методе градиента. Если же после очередного рабочего шага значение целевой функции увеличилось по сравнению с предыдущим значением, то движение прекращается, заново определяется направление градиента и т.д.

Повышенная скорость сходимости является существенным преимуществом этого метода.

2.3. Методы случайного поиска

Методы случайного поиска отличаются от регулярных (детерминированных) методов оптимизации намеренным введением элемента случайности. Регулярные методы оптимизации более тонко настроены на специфику исследуемого процесса. Методы случайного поиска наиболее эффективны при решении сложных задач больших размерностей с произвольно заданными целевыми функциями, ограничениями, тогда как регулярные методы, как правило, неприменимы.

Под *поиском* понимается процесс отыскания такого значения критерия оптимизации (целевой функции), которое близко к оптимальному и в то же время удовлетворяет всем ограничениям. Различают ненаправленный случайный поиск, направленный случайный поиск без самообучения, направленный случайный поиск с самообучением.

Ненаправленный случайный поиск

Ненаправленный случайный поиск (или метод статистических испытаний, метод Монте-Карло) заключается в многократном моделировании

независимых случайных вариантов решений из области допустимых, вычисления в каждом из них критерия оптимизации и запоминании ближайшего к экстремуму. Метод Монте-Карло относится к числу универсальных, поскольку позволяет решать многоэкстремальные задачи общего вида с отысканием глобального экстремума. Основным недостатком метода заключается в необходимости проведения большого числа испытаний для получения решения, достаточно близкого к оптимальному, т.е. наличие медленной сходимости к экстремуму.

Направленный случайный поиск без самообучения является модернизацией направленного случайного поиска. В основе метода лежит использование результатов поиска предыдущих шагов.

Направленный случайный поиск

Направленный случайный поиск с самообучением заключается в добавлении алгоритмов самообучения, которые корректируют вектор предыстории (случайный вектор E) преимущественно в направлении удачного предыдущего шага или в направлении, обратном предыдущему неудачному шагу, в случае нелинейной целевой функции, например путем перестройки вероятностей составляющих случайного вектора. Так, при целевой функции, близкой линейной, вероятность шага в удачном направлении увеличивается, и наоборот.

На базе широкого использования различных методов случайного поиска развилось новое направление в исследовании самых разнообразных процессов - имитационное моделирование. Вообще под имитацией понимается численный метод исследования системы, процесса, операции с помощью математических моделей, описывающих функционирование исследуемых систем, на ЭВМ для анализа и синтеза, интересующих исследователя случайных факторов, которыми изобилуют реальные системы, процессы, операции. Но в ряде случаев оно требует больших затрат на программирование, отладку моделей и проведение исследования, а также усложняется процесс интерпретации полученных результатов.

Использование методов случайного поиска определяется в основном следующими ситуациями:

- неприемлемостью или отсутствием соответствующих аналитических и численных методов исследования модели;
- возможностью создания модели функционирования системы (процесса), получением необходимого количества информации о моделируемой системе (процессе);
- наличием большого числа случайных факторов в исследуемой системе (процессе);
- наличием современной вычислительной техники и соответствующего программного обеспечения.

3. Вариационное исчисление

Методы исследования функций классического анализа, за исключением лишь некоторых случаев, наиболее эффективно применяются для оптимизации процессов с сосредоточенными параметрами. Лишь в ряде случаев, используя особенности математического описания конкретных процессов, указанными методами удастся решить некоторые задачи оптимизации процессов с распределенными параметрами. Для этих процессов решение характеризуется не совокупностью значений конечного числа независимых переменных, а соответствующей функцией независимой переменной (как, например, при решении задачи выбора оптимального температурного профиля в реакторе вытеснения).

Оптимальные задачи, когда решение представляется не как совокупность значений конечного числа переменных, а как совокупность функций, вид которых заранее не известен, и составляют предмет изучения специального раздела математики - *вариационного исчисления*.

Аналогично тому, как в обычном анализе характеризуется функция одной переменной

$$x = x(t). \quad (6.52)$$

В вариационном исчислении дается определение понятия *функционала* как правила, по которому сопоставляются *функция* $x(t)$ и некоторая *скалярная величина*

$$I = I[x(t)]. \quad (6.53)$$

Решением задачи отыскания экстремума функции $x(t)$ являются одно или несколько значений независимой переменной t , при которой функция $x(t)$ имеет экстремальное значение.

Решением же задачи отыскания экстремума функционала I служат одна или несколько функций $x^{(j)}(t)$, при подстановке которых в выражение (6.53) функционала его величина принимает экстремальное значение.

Функции $x^{(j)}(t)$ в этом случае называются экстремальными функционала. Причем, в зависимости от того, придает функция функционалу максимальное или минимальное значение, она называется *максималью* или *минималью*.

Понятие функционала обобщается также и на случай нескольких функций, т.е.

$$\tilde{I} = \tilde{I} [x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t)] \quad (6.54)$$

или с использованием векторной формы записи

$$\tilde{I} = \tilde{I} [x(t)], \quad (6.55)$$

где

$$x = x [x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t)]. \quad (6.56)$$

Кроме того, сами функции $x^{(j)}(t)$, от которых зависит значение функционала I , в свою очередь могут являться функциями нескольких независимых переменных t_i ($i = 1, \dots, p$).

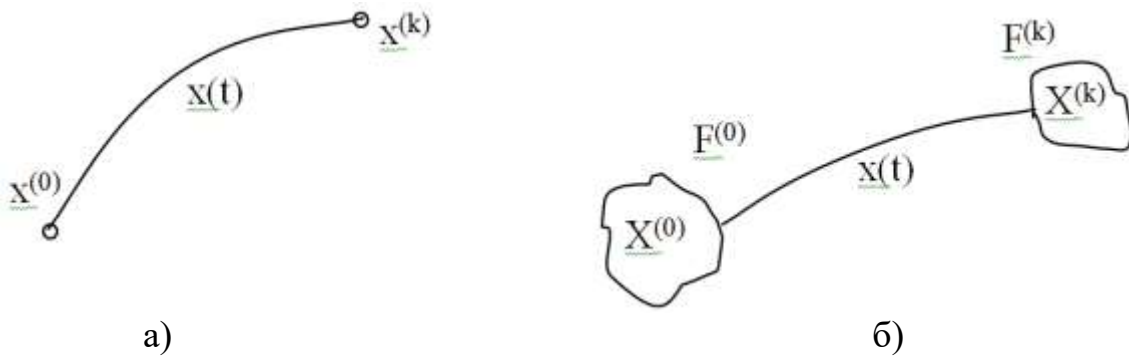


Рис. 6.4. а) траектория процесса в фазовом пространстве; б) задание в фазовом пространстве областей начальных и конечных состояний

Функционалу $I^{(3)}$ может быть придан наглядный геометрический смысл. Так, например, если представить совокупность функций

$$x_i(t) \quad i = 1, \dots, m \quad (6.57)$$

как параметрическое задание некоторой кривой в m -мерном пространстве переменных x_i , то величину функционала I можно рассматривать как определенную оценку непрерывной кривой (6.57), соединяющей две точки этого пространства с координатами $x^{(0)}$ и $x^{(k)}$. Поскольку величины могут являться переменными состояния некоторого процесса, кривая (6.57) может интерпретироваться как траектория в фазовом пространстве переменных x_i , определяющая промежуточные состояния процесса при его переходе из начального состояния $x^{(0)}$ в конечное $x^{(k)}$.

В общем случае начальное состояние может описываться не точкой n -мерного пространства, а некоторой областью $X^{(0)}$, ограниченной заданной поверхностью $F^{(0)}$ в указанном пространстве. Это относится и к конечному состоянию, которое может также определяться заданной областью $X^{(k)}$, ограниченной поверхностью $F^{(k)}$.

Траектория в фазовом пространстве, характеризующая промежуточные состояния процесса при его переходе из начального состояния в конечное, обычно называется *траекторией процесса* в данном пространстве.

Обычным выражением функционала служит интегральная зависимость, которую для одной функции $x(t)$ можно, например, представить как

$$I(x) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi(t, x) dt. \quad (6.58)$$

Причем - заданная функция переменных, в свою очередь, является функцией независимой переменной.

Пределы интегрирования в соотношении могут быть известными конечными числами, но возможны также случаи, когда один или оба предела бесконечны. Кроме того, целый ряд задач вариационного исчисления сводится к рассмотрению функционалов, у которых пределы интегрирования неизвестны.

Несложно записать выражение для функционала типа (6.58), когда функция x зависит от нескольких переменных. Например, для функции $x(t_1, t_2)$ можно привести следующий функционал:

$$I(t) = \int_{t_1^{(0)}}^{t_1^{(k)}} \int_{t_2^{(0)}}^{t_2^{(k)}} \varphi[t_1, t_2, x(t_1, t_2)] dt_1 dt_2. \quad (6.59)$$

Также обобщается запись функционала на случай нескольких функций. Например, для двух функций $x_1(t)$, $x_2(t)$ имеем

$$I(x_1, x_2) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi[t, x_1, x_2] dt. \quad (6.60)$$

Очевидно, что возможны и другие формы аналитического выражения функционала, например, когда функционал I представляется некоторой известной функцией от соотношений типа (6.58 – 6.60).

Основная задача вариационного исчисления заключается в отыскании таких непрерывных функций $x(t)$, которые придают заданному функционалу максимальное или минимальное значение. При этом, как и в обычном анализе, на неизвестные функции, подлежащие определению, могут быть наложены различные ограничивающие условия.

Одним из важнейших условий, часто встречающихся в практических приложениях вариационного исчисления, являются ограничения, заданные в форме дифференциальных уравнений. Например, для функционала типа (6.60) подобное ограничение может иметь вид уравнения

$$\frac{dx_1}{dt} = x_2 \quad (6.61)$$

с учетом которого выражение для функционала (6.60) можно представить как

$$I(x_2) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi[t, x, x'] dt, \quad (6.62)$$

где значение производной обозначено через x^1 .

Для функционала от нескольких функций вида (6.54)

$$I(x_1, x_2, \dots, x_{2m}) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi(t, x_1, x_2, \dots, x_{2m}) dt \quad (6.63)$$

при наличии ограничений в форме системы дифференциальных уравнений

$$\frac{dx_i}{dt} = x_{m+1} \quad i = 1, \dots, m \quad (6.64)$$

выражение для функционала может быть также записано в виде (6.62)

$$I(x_1, x_2, \dots, x_m) = \int_{t^{(0)}}^{t^{(k)}} \varphi[t, x_1, \dots, x_m, x'_1, \dots, x'_m] dt. \quad (6.65)$$

В простейшем случае, когда начальное и конечное состояния траектории процесса фиксированы, задание граничных условий сводится к заданию значений всех неизвестных функций при значениях независимой переменной $t^{(0)}$ и $t^{(k)}$, соответствующих началу и концу траектории, т.е. задается совокупность значений

$$x_i(t^{(0)}) = x_i^{(0)} \quad i = 1, \dots, m; \quad (6.66)$$

$$x_i(t^{(k)}) = x_i^{(k)} \quad i = 1, \dots, m. \quad (6.67)$$

В более общем случае, когда задаются лишь области $F^{(0)}$ и $F^{(k)}$ возможных начальных и конечных значений искомых функций, граничные условия задаются в виде уравнений поверхности, ограничивающих эти области

$$F^{(0)}(x_1, x_2, \dots, x_m) = 0; \quad (6.68)$$

$$F^{(k)}(x_1, x_2, \dots, x_m) = 0. \quad (6.69)$$

Если начальное и конечное значения независимой переменной t не заданы, то вид ограничивающих поверхностей $F^{(0)}$ и $F^{(k)}$ определяемых уравнениями (6.68) и (6.69), может зависеть и от значения независимой переменной, т.е.

$$F^{(0)}(t, x_1, x_2, \dots, x_m) = 0; \quad (6.70)$$

$$F^{(k)}(t, x_1, x_2, \dots, x_m) = 0. \quad (6.71)$$

В этом случае переменную целесообразно включить в число переменных фазового пространства, в результате чего траектория процесса будет изображаться уже в расширенном пространстве, имеющем размерность $m+1$.

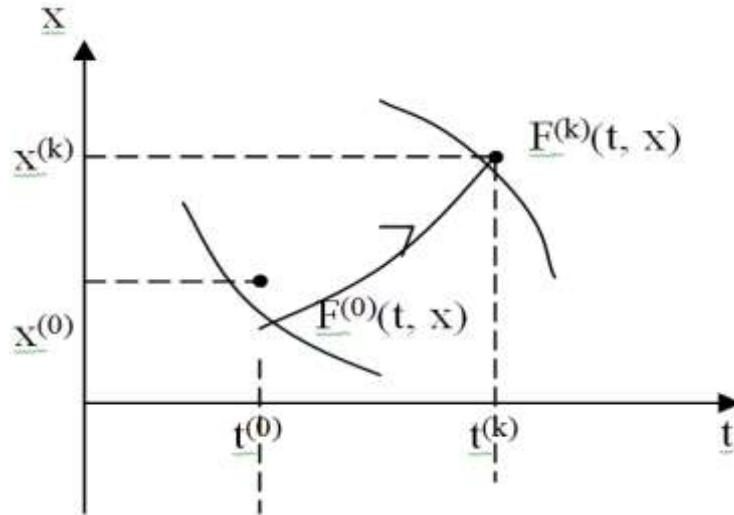


Рис. 6.5. Задание начальных и конечных состояний на фазовой плоскости

Для процесса, состояние которого определяется, например, значением только одной переменной состояния $x(t)$, расширенное фазовое пространство представляется в виде фазовой плоскости переменных x и t .

Пусть области начальных и конечных значений переменной x характеризуются уравнениями

$$F^{(0)}(t, x) = 0; \quad (6.72)$$

$$F^{(k)}(t, x) = 0, \quad (6.73)$$

которые на фазовой плоскости $x - t$ изображаются линиями. Тогда решение оптимальной задачи с функционалом (6.62) сводится к выбору такой траектории, соединяющей на фазовой плоскости линии, определяемые уравнениями (6.72) и (6.73), вдоль которой функционал (6.62) имеет экстремальное значение. При этом определяют точки начального и конечного состояний процесса.

Итак, решением задачи отыскания экстремали функционала является некоторая функция (или совокупность функций) одной или нескольких независимых переменных. Математический аппарат вариационного исчисления может быть использован для оптимизации процессов, в которых переменные состояния изменяются непрерывным образом. К числу таких процессов можно отнести процессы перехода управляемых объектов из одного

состояния (начального) в другое (конечное) с изменяющимися во времени переменными состояниями, т.е. нестационарные процессы.

Также классом процессов, в которых переменные состояния изменяются непрерывным образом, являются процессы с распределенными параметрами, где переменные состояния изменяются в зависимости от пространственных координат.

Таким образом, эти два класса процессов - нестационарные и с распределенными параметрами - и составляют область применения методов вариационного исчисления в химической технологии.

Пример. Математическое описание нестационарного режима периодически действующего реактора идеального смешения представляется системой уравнений с граничными условиями

$$\frac{dx_A}{d\tau} = \omega_A(x_A, x_P, T); \quad (6.74)$$

$$\frac{dx_P}{d\tau} = \omega_P(x_A, x_P, T);$$

$$x_A(0) = x_A^{(0)} \quad x_P(0) = 0,$$

где x_A - концентрация исходного реагента; x_P - концентрация продукта реакции.

Предполагается, что между концентрациями реагентов А и Р в любой момент времени выполняется соотношение

$$x_A + x_P = x_A^{(0)}, \quad (6.75)$$

означающее, что, кроме продукта Р, никаких других продуктов в ходе реакции не образуется.

Требуется записать функционал, значение которого определяет выход продукта реакции Р для заданных времени пребывания реагентов $f^{(k)}$ и программы изменения температуры в реакторе $T(f)$ ($0 \leq f \leq f^{(k)}$).

Р е ш е н и е

Из уравнения (6.75) можно получить функционал

$$x_P^{(k)} = \int_0^{\tau(k)} \omega_P(x_A, x_P, T) dt, \quad (6.76)$$

который необходимо анализировать с учетом ограничивающих условий (6.74) и (6.76). Эти условия позволяют найти зависимости

$$T = T(x_A, x'_A). \quad (6.76)$$

подставляя которые в выражение функционала (6.76), можно записать его в виде

$$x_p^{(k)} = \int_0^{\tau(k)} \omega_p [x_A, x_p(x_A, x'_A), T(x_A, x'_A)] d\tau. \quad (6.77)$$

Если ввести обозначения

$$\omega_p [x_A, x_p(x_A, x'_A), T(x_A, x'_A)] = \varphi(x, x') \quad (6.78)$$

$$x_A = x \quad x_p^{(k)} = I(x),$$

то функционал (6.76) можно представить в форме

$$I(x) = \int_0^{\tau(k)} \varphi(x, x') d\tau, \quad (6.79)$$

отличающейся от формы записи функционала лишь тем, что в подынтегральном выражении (6.79) отсутствует в явном виде независимая переменная τ .

Таким образом, задача максимизации выхода продукта реакции Р в периодическом реакторе идеального смешения может быть сведена к задаче максимизации функционала (6.79). В результате ее решения можно найти оптимальную программу изменения температуры в реакторе $T(f)$, максимизирующую выход продукта Р для заданного времени пребывания реагентов в аппарате. Итак, решение любой оптимизационной задачи состоит из трех следующих этапов:

- 1) определение множества допустимых решений;
- 2) обоснование критерия оптимальности;
- 3) выбор наилучшего решения.

В практических задачах оптимизации существуют два вида их постановки. В первом случае точками допустимого пространства X_g являются наборы вещественных чисел $(x_1, x_2, \dots, x_n)$, а целевой функцией будет $K(x) = K(x_1, x_2, \dots, x_n)$ - обычная вещественная функция от n вещественных аргументов (n - размерность пространства). Такая задача называется задачей оптимизации функции.

Во втором случае в качестве допустимого множества выступает некоторое множество функций вещественных переменных $y(x_1, x_2, \dots, x_n)$, а целевая функция есть некоторый функционал K , сопоставляющий каждой функции $y(x_1, x_2, \dots, x_n)$ некоторое вещественное число $K(y)$. Такую задачу называют задачей оптимизации функционалов или вариационной задачей.

С формальной точки зрения обе постановки задачи идентичны: в обоих случаях необходим поиск точки в некотором пространстве, оптимизирующей значение целевой функции. Различие заключается в природе элементов этого пространства, что вызывает и различие в применяемых методах решения задач.

При постановке конкретных задач оптимизации как в терминах экономических, так и технологических оценок критерий оптимальности должен быть записан в виде аналитического выражения.

Критерий оптимальности детерминированного процесса в общем виде может быть представлен как функция входных, выходных и управляющих (оптимизируемых) параметров

$$R = R(x_1, x_2 \dots x_n; y_1, y_2, \dots, y_m; u_1, u_2, \dots u_k).$$

Основной задачей оптимизации является нахождение экстремума (минимума или максимума) функции критерия оптимальности. Нахождение экстремума функции возможно различными методами. Выбор того или иного метода нахождения оптимума является одним из важнейших этапов оптимизации.

Методы поиска оптимума можно разделить на следующие группы:

- аналитические методы;
- методы математического программирования.

Группа *аналитических* методов оптимизации объединяет аналитический поиск экстремума функции, метод множителей Лагранжа, вариационные методы и принцип максимума. Аналитический поиск экстремума функции, заданных без ограничений на независимые переменные является наиболее простым, но применяется к задачам, у которых оптимизируемая функция имеет аналитическое выражение, дифференцируемое во всем диапазоне исследования, а число переменных невелико.

Группа методов *математического программирования* включает: *динамическое программирование, линейное программирование и нелинейное программирование.*

Динамическое программирование – эффективный метод решения задач оптимизации многостадийных процессов. Метод предполагает разбивку анализируемого процесса на стадии (во времени или в пространстве). Рассмотрение задачи начинается с последней стадии процесса, и оптимальный режим определяется постадийно.

Линейное программирование – метод для решения задач оптимизации с линейными выражениями для критерия оптимальности и линейными ограничениями на область изменения переменных. Подобные задачи решаются итерационными способами. Эти методы используются при оптимальном планировании производства при ограниченном количестве ресурсов, для транспортных задач и др.

Методы нелинейного программирования объединяют различные способы решения оптимальных задач: градиентные, безградиентные и случайного поиска. Общим для методов нелинейного программирования является то, что их используют при решении задач с нелинейными критериями оптимальности. Все методы нелинейного программирования – это численные методы поискового типа. Суть их заключается в определении набора независимых переменных, дающих наибольшее приращение оптимизируемой функции. Данная группа методов применяется как для детерминированных, так и стохастических процессов.

Вопросы самоконтроля

1. Что представляет собою оптимизация?
2. Постановка задачи оптимизации.
3. Что представляют собою цели оптимизации?
4. Что представляют собою ресурсы оптимизации?
5. Что представляет собой критерий оптимизации?
6. Какие требования предъявляются к критерию оптимизации?
7. 3. Как обеспечивается достижение экстремального значения критерия оптимальности?
8. Условия постановки задачи оптимизации.
9. Методы поиска экстремума (оптимизации).
10. Классические методы. Метод прямого перебора.
11. Классические методы. Классический метод дифференциального исчисления.
12. Классические методы. Метод множителей Лагранжа.
13. Методы поиска экстремума унимодальных функций.
14. Методы поиска экстремума унимодальных функций. Метод половинного деления.
15. Методы поиска экстремума унимодальных функций. Метод чисел Фибоначчи.
16. Методы поиска экстремума унимодальных функций. Метод золотого сечения.
17. Регулярные (детерминированные) методы оптимизации.
18. Достоинства и недостатки градиентных методов.
19. Как организуется вычислительная процедура движения по градиенту?
20. Регулярные (детерминированные) методы оптимизации. Метод покоординатного спуска (подъема).
21. Регулярные (детерминированные) методы оптимизации. Метод градиента.
22. Регулярные (детерминированные) методы оптимизации. Метод наискорейшего спуска.

23. Методы случайного поиска.
24. Методы случайного поиска. Метод Монте-Карло.
25. Методы случайного поиска. Направленный поиск без самообучения.
26. Методы случайного поиска. Направленный случайный поиск с самообучением.
27. Что представляет собою предмет вариационного исчисления?
28. Вариационное исчисление. Понятие функционала.
29. Вариационное исчисление. Экстремаль.
30. Вариационное исчисление. Траектория процесса в заданном пространстве.
31. Вариационное исчисление. Основная задача.
32. Вариационное исчисление. Задание начальных и конечных состояний на фазовой плоскости.
33. Вариационное исчисление. Область применения по классам процессов.
34. Вариационные задачи с ограничениями.

Литература

1. *Батунер Л.М.* Математические методы в химической технике. - 6-е изд., исправленное / Л.М. Батунер, М.Е. Позин; под ред. М.Е. Позина. - Л.: Химия, 1971. – 824 с.
2. *Бахвалов Н.С.* Численные методы / Н.С. Бахвалов. – М.: Наука, 1993.
3. *Брановицкая С.В.* Вычислительная математика в химии и химической технологии / С.В. Брановицкая, Р.Б. Медведев, Ю.Я. Фиалков. - К.: Вища школа, 1986. – 216 с.
4. *Бояринов А.И.* Методы оптимизации в химической технологии / А.И. Бояринов, В.В. Кафаров. – М.: Химия, 1969. – 564 с.
5. *Гартман Т.Н.* Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учеб. пособие для вузов / Т.Н. Гартман, Д.В. Клупшин. - М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. - 416 с.
6. *Гайдадин А.Н.* Методы оптимизации в технологической практике / А.Н. Гайдадин, С.А. Ефремова, А.В. Нистратов. - Волгоград: ВолгГТУ, 2008. – 16 с.
7. *Закгейм А.Ю.* Введение в моделирование химико-технологических процессов / А.Ю. Закгейм. - М.: Химия, 1982. – 288 с.
8. *Гайдадин А.Н.* Методы оптимизации в технологической практике / А.Н. Гайдадин, С.А. Ефремова, А.В. Нистратов. - Волгоград: ВолгГТУ, 2008. – 16 с.
9. *Дворецкий Д.С.* Компьютерное моделирование биотехнологических процессов и систем / Д.С. Дворецкий, С.И. Дворецкий, Е.И. Муратова, А.А. Ермаков. - Тамбов: ТГТУ, 2005. – 80 с.

10. *Кафаров В.В.* Анализ и синтез химико-технологических систем: учеб. для вузов / В.В. Кафаров, В.П. Мешалкин. - М.: Химия, 1991. – 432 с.
11. *Кузнецов А.В.* Высшая математика. Математическое программирование / А.В. Кузнецов, В.А. Сакоич, Н.И. Холод. - Минск: Высшэйшая школа, 1994. – 288 с.
12. *Саулин Д.В.* Математическое моделирование химико-технологических систем: конспект лекций / Д.В. Саулин. – Пермь: Перм. гос. техн. ун-т, 2003. - 91 с.
13. Математическая энциклопедия.
http://dic.academic.ru/dic.nsf/enc_mathematics/4128
14. Математический энциклопедический словарь /Гл. ред. Ю.В. Прохоров. - М.: Советская энциклопедия, 1988. – 847 с.
15. *Пантелеев А.В.* Методы оптимизации в примерах и задачах: учеб. пособие. - 2-е изд., исправл./ А.В. Пантелеев, Т.А. Летова. - М.: Высшая школа, 2005. – 544 с.
16. *Поляк Б.Т.* Введение в оптимизацию / Б.Т. Поляк. - М.: Наука, 1983. – 384 с.
17. *Рейлиз В.И.* Методы оптимизации: электронный учебник по дисциплине «Методы оптимизации» / В.И. Рейлиз. - Томск: НИТПолитех. у-т, - <http://109.123.146.125/97/>
18. *Федорова С.А.* Методические указания по дисциплине «Математическое моделирование и применение ЭВМ в химической технологии для студентов заочной формы обучения» / С.А. Федорова. – Севастополь: СИЯЭиП, 2001. – 68 с.

ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНАЯ ЛЕКЦИЯ

В середине прошлого столетия химическая технология вступила в новый этап своего развития, который характеризуется созданием высокопроизводительной аппаратуры, а также разработкой систем автоматизации, контроля, управления и оптимизации не только отдельных процессов, но и их взаимосвязанных комплексов.

Все это неразрывно связано со значительным расширением аналитических и экспериментальных исследований, в результате которых можно получить необходимую информацию о технологических процессах, а также с применением математических методов и электронной вычислительной техники для рационального использования этой информации в целях непрерывного прогресса химических технологий.

В изучении реально протекающих в природе процессов особая роль принадлежит математически формализованной модели. Математическая модель - это лишь специальный способ описания, позволяющий для анализа использовать формально-логический аппарат математики. Формализованная на том или ином языке (дифференциальных или разностных уравнений, теории автоматического управления и т.д.) математическая модель отражает определенные свойства реальных процессов и с ее помощью можно изучать эти свойства.

Разработка математической модели отвечает на вопросы: что изучаем и для чего, какие уравнения используем, насколько верно модель отражает исследуемые свойства оригинала. Вначале мы четко должны определить объект исследования, его существенные стороны, оцениваемые качества, методы и средства контроля, поскольку их точность влияет на качество исходных данных и т.п. Определить класс процессов и группы математических уравнений в составе математического описания объекта. Завершающий этап моделирования – это оценка работоспособности модели, ее надежности и, как следствие, использование модели, интерпретация полученных на модели результатов.

Основным в построении модели является цель. Любой объект, процесс, явление сложны, и для них могут быть построены различные модели в зависимости от конкретно решаемой задачи, от того, для какой цели строится модель. Действительно, для абсолютного большинства известных объектов имеется целый ряд моделей в зависимости от конкретной задачи, которую предстоит решить.

Модель всегда беднее описываемого объекта, и решение вопроса о необходимости степени соответствия (адекватности, изоморфности) модели реальному объекту связано в основном с конкретными требованиями к разрабатываемой системе управления. Кроме того, для сложного объекта не всегда удастся ограничиться одноразовым построением модели, так как

условия течения процесса в данном объекте являются причиной изменения не только параметров, но и структуры модели. В этих случаях, а также при проектировании систем при неполной информации об объекте управления современные методы теории и практики управления предусматривают применение специальные методов в системе управления в целях уточнения модели в процессе функционирования и управления объектом (адаптивные, самонастраивающиеся системы, системы дуального управления и др.). Во всех этих случаях, хотя первоначальная модель является далеко неполной, ее уточнение осуществляется в процессе управления, и задача построения модели решается самой системой управления.

В настоящее время разработаны достаточно эффективные методы количественной оценки степени соответствия модели реальному объекту, однако, решение задачи о необходимой степени этого соответствия осуществляется на базе конкретных требований, предъявляемых к результатам управления.

Явно, что возможность использования модели для теоретических и практических целей приводит к требованию наиболее простой в каком-либо смысле модели (по размерности, порядку дифференциального уравнения, скорости реализации на ПК и др.). Создание для данного объекта простой модели по сравнению с общей теоретической моделью возможно в связи с тем, что для конкретного объекта класс входных сигналов уже, и состояние объекта не столь широки и т.д. Разумным требованием в первую очередь является представление данного объекта с помощью хорошо изученных моделей. Разработку специализированной модели следует осуществлять только в особо обоснованных случаях.

В первую очередь возникает задача о необходимости ограничения количества входных переменных, включаемых в рассмотрение и определяющих приближенно заданную цель, заданные выходные переменные. Решение этой задачи во многом определяется априорной информацией об объекте. Однако для сложного промышленного объекта, управление которым собственно и требует проведения идентификации, априорная информация часто мала и не дает возможности до опыта точно установить необходимое количество входных переменных. Это обстоятельство в большинстве случаев обусловлено тем, что имеющиеся уравнения исследуемого процесса хорошо описывают объект в идеальных условиях; они получены в лабораторных условиях, но эти закономерности не выполняются вовсе или выполняются слабее в реальных условиях производства.

Таким образом, оценка степени и формы связи между входными и выходными величинами должна быть произведена по реализациям этих величин, полученным в условиях реального функционирования объекта.

Далее, построение модели для конкретного объекта требует отнесения последнего к известному классу объектов, т.е. предлагается, что имеется

заранее подготовленная классификация множества объектов и при идентификации по результатам измерений входа и выхода данный объект необходимо отнести к определенному классу. Трудность этой задачи очевидна, и при наличии полного каталога возможных систем разумная постановка задачи заключается в проверке гипотезы и принадлежности данного объекта к данному классу на основании обработки реализаций входных и выходных сигналов.

По реализациям входных и выходных переменных необходимо решать задачу, с помощью какой модели может быть представлен данный объект (линейной или нелинейной, стационарной или нестационарной, безынерционной или динамической), можно ли ограничиться одноразовой моделью или необходимо постоянно ее уточнять, какова степень адекватности (изоморфности), представленная данной моделью, и др. Круг этих задач широк, и их решение сопряжено с большими теоретическими и практическими трудностями. Однако игнорировать эти задачи не представляется возможным, так как они являются неотъемлемой частью идентификации и от их решения зависит качество идентификации.

Единый аналитический подход к получению динамических моделей различных объектов на основе физической сущности протекающих в объекте процессов имеет ряд практических преимуществ, связанных с ограничением класса моделей и возможностью их последней типизации. Последнее обстоятельство чрезвычайно важно, так как для одних и тех же моделей возможно применение одних и тех же принципов и средств, что может послужить основой для серийного производства систем управления.

Как указывалось, модель является только приближенным представлением реального объекта, и учесть все многообразие факторов, влияющих на каждый объект, процесс, явление в принципе не представляется возможным. Поэтому модель можно рассматривать как стохастическую, т.е. выходная переменная каждой модели представляет собой реализацию выходной переменной объекта и существует плотность вероятности выходной переменной относительно фиксированной входной переменной объекта. Существуют и другие особенности модели, которые носят общий характер и еще непосредственно не связаны с понятием идентификации, хотя и имеют к последней прямое отношение. Основные особенности, связанные с идентификацией, следующие.

1. Построение модели объекта может осуществляться многими способами: на базе теоретического анализа; на основании физических, химических, биологических, экономических и других закономерностей, присущих данному объекту; на основании обобщения предыдущего опыта; на базе логического анализа; на основании эксперимента и др. Решение задачи идентификации связано с экспериментом. Результаты измерений входных и выходных переменных объекта служат основой для создания или уточ-

нения модели данного объекта. Таким образом, в своей основе идентификации представляет собой экспериментальный метод построения модели по входным и выходным сигналам объекта. В тех случаях, когда входные и выходные переменные заданы для конкретного объекта, а не получены путем синхронного измерения на объекте, задача идентификации объекта по этим сигналам не может быть поставлена. Естественным требованием идентификации, вытекающим из приведенной формулировки, является измеримость входных и выходных переменных.

2. Решение задачи идентификации связано с получением экспериментальных данных о сходных и выходных переменных объекта в условиях реального функционирования объекта. Это значит, что измерения входных и выходных сигналов производятся при нормальной работе объекта и, конечно, охватывают весь диапазон входных сигналов и состояния объекта. При этом несущественно, какие сигналы вводятся в объект - естественные, специально подготовленные или искусственные, но важно то, что измерения этих сигналов, как и выходных сигналов, производятся синхронно в условиях нормальной работы объекта. Это требование имеет ряд преимуществ и, кроме того, связано с некоторыми недостатками. При решении задач управления данным конкретным объектом мы стремимся к тому, чтобы иметь наиболее полную модель именно этого объекта с учетом внешних воздействий и условий его работы. Эти данные лучше всего можно получить путем исследования данного конкретного объекта, т.е. по результатам синхронной записи его входных и выходных переменных. Однако отсутствие возможности проводить исследования объекта в широком диапазоне изменения входных воздействий и его состояния, ограниченного реальными условиями, возможными авариями и т.д., не дает уверенности в том, что полученная модель адекватна данному объекту, а расписанные по этой модели режимы в действительности в каком-то смысле оптимальны.

Таким образом, под идентификацией понимают построение модели по полученным в реальных условиях функционирования объекта входным и выходным переменным.

Различная постановка задачи идентификации привела в свое время к необходимости различать идентификацию в узком и широком смысле. Под идентификацией в узком смысле понимали определение по входным и выходным сигналам коэффициентов известного уравнения объекта, а под идентификацией в широком смысле - построение по этим же данным модели объекта, включающее решение довольно широкого круга задач.

В настоящее время нет необходимости иметь два определения идентификации, и здесь указан только тот основной круг задач, который вытекает из приведенного выше определения.

В общем случае исходной информацией для идентификации являются реализации входных и выходных переменных, полученные в условиях

нормального функционирования объекта. Это положение сразу же налагает ряд существенных требований, что приводит к ряду задач, практическое решение которых имеет первостепенное значение, но, к сожалению, сопряжено с рядом трудностей.

При моделировании химико-технологических процессов применяются все основные методы и системы, используемые в других областях, и, кроме того, ряд специфических, обуславливаемых необходимостью контроля и регламентации физико-химических свойств веществ и условиями проведения химико-технологических процессов: высокими давлениями и температурами, агрессивностью перерабатываемых сред, необходимостью обеспечения безопасности при любых, в частности потенциально опасных, процессах. Технологический процесс и оборудование, в котором он протекает, представляют собой объект управления, а комплекс технических средств и персонал, непосредственно участвующий в управлении, образуют систему управления.

При любом виде управления в той или иной степени выполняются следующие этапы:

- 1) получение информации о состоянии объекта управления;
- 2) обработка и анализ полученной информации, на основании чего формируется решение о необходимости и характере воздействий на объект управления;
- 3) реализация принятого решения.

Выполнение первого этапа связано с определением значений величин, характеризующих состояние объекта управления - давлений, температур, расходов рабочих сред, уровней в технологических аппаратах, физико-химических показателей и перерабатываемых веществ на различных стадиях процесса.

Математическая модель является не только базой для разработки системы управления. Модель тесно связана с решением комплекса задач, относящихся к автоматизации данного процесса, хотя она строится в основном для решения задач управления.

На базе построенной математической модели осуществляются изменения технологического процесса, уточняются режимы и маршруты получения заданного продукта, решаются задачи выбора оптимальных в определенном смысле межоперационных требований на полуфабрикаты и допустимых отклонений от них, устанавливаются рациональные методы межоперационного контроля и контроля готового продукта и др.

На основе результатов моделирования в случае необходимости намечаются направления модернизации существующего процесса в целях использования оптимальных технологических схем получения продукта. Кроме того, для вновь разработанных процессов модели служат основой для одновременного создания объекта и системы управления.

Применение современных методов управления требует знания в той или иной степени динамических характеристик объекта управления, т.е. необходимо также иметь его формализованное представление в виде уравнения, математической модели. Построение математической модели объекта управления является первоочередной задачей, которую необходимо решать при разработке системы управления сложным объектом.

Дело в том, что по математической модели объекта осуществляется выбор структуры и параметров системы управления, формируются критерии оптимальности и ограничения, решаются задачи прогнозирования и точности, осуществляется выбор технических средств управления и т.д. В редких случаях, только для относительно простых явлений и процессов удается построить модель, с высокой точностью отражающую реальное явление или процесс.

После того, как получены математические модели исследуемых процессов и системы, формулируют задачу оптимизации и выбирают метод оптимизации (метод отыскания экстремума выбранного критерия оптимальности). Реализация задач оптимизации предусматривает выбор такого технологического режима, при котором некоторые критерии, характеризующие качество управления, достигают экстремальных значений. Решение задач такого рода, заключающееся в нахождении оптимального алгоритма поведения системы, позволяет определить оптимальную структуру системы для каждого случая. Однако из-за ограничений информации об объектах управления удается реализовать только субоптимальные системы, параметры которых отличаются от оптимальных.

Использование математического моделирования обеспечивает повышение качества продукции и улучшение экономических показателей производства за счет выбора и поддержания оптимальных технологических режимов. Кроме того, применение современных методов управления невозможно без математических моделей технологических процессов, т.е. зависимостей, устанавливающих количественные соотношения между основными переменными, характеризующими протекание процесса.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Амирова С.А.* Основы теоретического анализа химико-технологических процессов: метод. рекомендации / С.А. Амирова, С.В. Островский. - Ч. I, II. - Екатеринбург: УрОРАН, 1992.
2. *Андросов И.В.* Оптимизация и оптимальное проектирование объектов химической технологии с применением ЭВМ / И.В. Андросов, Н.В. Халепа, Г.В. Цибизов. – Тула, 1993.
3. *Банди Б.* Методы оптимизации. Вводный курс / Б. Банди: Пер. с англ. - М.: Радио и связь, 1988. – 128 с.
4. *Батунер Л.М.* Математические методы в химической технике. - 6-е изд., исправленное / Л.М. Батунер, М.Е. Позин; под ред. М.Е. Позина. - Л.: Химия, 1971. – 824 с.
5. *Бахвалов Н.С.* Численные методы / Н.С. Бахвалов. – М.: Наука, 1993.
6. *Бельков В.П.* Математические модели химико-технологических процессов / В.П. Бельков, В.В. Шестопалов, В.В. Кафаров. - Ч. 2. - М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева, 1981. - 40 с.
7. *Берцун В.Н.* Математическое моделирование на графах. Часть 2: Томск: Изд-во Том. Ун-та, 2013. – 88с.
8. *Бесков В.С.* Моделирование каталитических процессов и реакторов / В.С. Бесков, В. Флокк. - М.: Химия, 1991. – 256 с.
9. Большая Советская Энциклопедия.
<http://bse.sci-lib.com/article060914.html>
10. *Бондарь А.Г.* Математическое моделирование в химической технологии / А.Г. Бондарь. – Киев: Вища школа, 1973. – 280 с.
11. *Бояринов А.И.* Методы оптимизации в химической промышленности / А.И. Бояринов, В.В. Кафаров. - М.: Химия, 1975. – 576 с.
12. *Брановицкая С.В.* Вычислительная математика в химии и химической технологии / С.В. Брановицкая, Р.Б. Медведев, Ю.Я. Фиалков. - К.: Вища школа, 1986. – 216 с.
13. *Гайдадин А.Н.* Методы оптимизации в технологической практике / А.Н. Гайдадин, С.А. Ефремова, А.В. Нистратов. - Волгоград: ВолгГТУ, 2008. – 16 с.
14. *Гартман Т.Н.* Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учеб. пособие для вузов / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин. - М.: ИКЦ «Академкнига», 2006. – 416 с.
15. *Гартман Т.Н.* Практическое руководство по решению некоторых вычислительных задач с использованием MICROSOFT EXCEL / Л.И. Артемьева, В.В. Васильев, Т.Н. Гартман, В.Н. Калинин, А.В. Курилова, Д.К. Новикова, В.В. Осипчик, С.Д. Петрищев, Е.Н. Павличева, И.И. Тамбовцев, А.М. Урусов, М.Л. Чеботарева, Э.А. Шакина, О.П. Шумакова; под ред. Т.Н. Гартмана. - М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2006. – 68 с.

16. *Гартман Т.Н.* Статистическая обработка результатов активного эксперимента / Т.Н. Гартман, В.В. Васильев, С.Д. Петрищев, Е.Н. Павличева, И.И. Тамбовцев, А.М. Урусов, Д.К. Новикова, В.В. Осипчик, В.Н. Калинин, Э.А. Шакина, О.П. Шумакова; под ред. Т.Н. Гартмана. - М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2006. – 52 с.

17. *Гартман Т.Н.* Введение в системы прикладной информатики химических предприятий / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин, В.В. Васильев, Е.Н. Павличева. - М., 2006. – 38 с.

18. *Гартман Т.Н.* Решение типовых задач по моделированию и оптимизации / Т.Н. Гартман, А.И. Новиков, Н.Н. Цуканова, Ю.К. Щипин / Под ред. А.И. Боянрова. - М.: МХТИ им. Д.И. Менделеева, 1980. – 80 с.

19. *Гордеев Л.С.* Математическое моделирование химико-технологических систем / Л.С. Гордеев, Е.С. Кадосова, В.В. Марков, Ю.В. Сбоева. - М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 1999. - Ч. 1. Методологические и теоретические основы: Текст лекций. – 48 с.

20. Графы. <http://www.allbest.ru/>

21. *Гребенник А.В.* Компьютерная обработка результатов эксперимента и моделирование в лабораторном практикуме по физической химии / А.В. Гребенник; под ред. А.В. Вишнякова. - М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 1999. – 80 с.

22. *Дворецкий Д.С.* Компьютерное моделирование биотехнологических процессов и систем / Д.С. Дворецкий, С.И. Дворецкий, Е.И. Муратова, А.А. Ермаков. - Тамбов: ТГТУ, 2005. – 80 с.

23. *Дворецкий С.И.* Компьютерное моделирование технологических процессов: метод. указ./ С.И. Дворецкий, А.В. Майстренко. - Тамбов: Тамб. гос. техн. ун-т, 2001. – 36 с.

24. *Закгейм А.Ю.* Введение в моделирование химико-технологических процессов / А.Ю. Закгейм. - М.: Химия, 1982. – 288 с.

25. *Закгейм А.Ю.,* Одинцов К.Ю. Методические указания к лабораторному практикуму по курсу химические реакторы и процессы, и их моделирование / А.Ю. Закгейм, К.Ю. Одинцов. - М.: МИТХТ им. М.В. Ломоносова, 2001. – 32 с.

26. *Закгейм А.Ю.* Математическое моделирование химико-технологических процессов: метод. указания к практикуму по курсу «Математическое моделирование химико-технологических процессов» / А.Ю. Закгейм, О.Н. Шишилов, Е.М. Кацман. - М.: ИПЦ МИТХТ им. М.В. Ломоносова, 2010. – 36 с.

27. *Кафаров В.В.* Методы кибернетики в химии и химической технологии / В.В. Кафаров. – М.: Химия, 1985. – 448 с.

28. *Кафаров В.В.* Математическое моделирование основных процессов химических производств / В.В. Кафаров, М.Б. Глебов. – М.: Высшая школа. – 1991. – 389 с.

29. Кафаров В.В. Анализ и синтез химико-технологических систем: учебник для вузов / В.В. Кафаров, В.П. Мешалкин. - М.: Химия, 1991. - 432 с.
30. *Кафаров В.В.* Математические основы автоматизированного проектирования химических производств: методология проектирования и теория разработки оптимальных технологических схем / В.В. Кафаров, В.П. Мешалкин, В.Л. Перов. - М.: Химия, 1979. - 320 с.
31. *Кафаров В.В.* Принципы математического моделирования химико-технологических систем / В.В. Кафаров, В.Л. Перов, В.П. Мешалкин. - М.: Химия, 1974. - 344 с.
32. *Кафаров В.В.* Программирование и вычислительные методы в химии и химической технологии / В.В. Кафаров, В.Н. Ветохин, А.И. Бояринов. - М.: Наука, 1972.
33. Кинетическая модель механизма компенсированного распада углеводородов на платине.
<http://articles.excelion.ru/science/biology/65523800.html>
34. Конспект лекций по курсу "Моделирование ХТП" ХТС ОПУ. Интернет издание. <http://opu.odessa.ua/konsp/MMХТР/>
35. *Кочетков П.А.* Краткий курс теории вероятности и математической статистики: учеб. пособие / П.А. Кочетков. - М.: МГИУ, 1999. - 51 с.
36. *Кузичкин Н.В.* Методы и средства автоматизированного расчета химико-технологических систем / Н.В. Кузичкин, С.Н. Саутин, А.Е. Пунин и др. - Л.: Химия, 1987. - 152 с.
37. *Кузнецов А.В.* Высшая математика. Математическое программирование / А.В. Кузнецов, В.А. Сакоич, Н.И. Холод. - Минск: Высшая школа, 1994. - 288 с.
38. *Литовка Ю.В.* Получение оптимальных проектных решений и их анализ с использованием математических моделей / Ю.В. Литовка. - Тамбов: ТГТУ, 2006. - 160 с.
39. *Луговской В.И.* Конспект лекций по курсу «Математическое моделирование химико-технологических процессов»: электронный конспект лекций / В.И. Луговской, К.С. Синявский, Р.В. Дубс. - Одесса: Политехнический университет, 2002.
40. *Маликов И.Т.* Вычислительные методы и применение ЭВМ / И.Т. Маликов, Р.В. Кветный. - К.: Вища школа, 1989. - 216 с.
41. Математическая энциклопедия.
http://dic.academic.ru/dic.nsf/enc_mathematics
42. Математический энциклопедический словарь / Гл. ред. Ю.В. Прохоров. - М.: Советская энциклопедия, 1988. - 847 с.
43. Математическое моделирование систем связи : учеб. пособие / К.К. Васильев, М.Н. Служивый. - Ульяновск: Ул. ГТУ, 2008. - 170 с.
44. Математическое описание элементов ХТС в современных программных продуктах. Модели и моделирование. http://mm.lti-gti.ru/works_lectures/SAXT/7.htm

45. Научная библиотека избранных естественнонаучных изданий.
http://www.sernam.ru/book_mm.php
46. *Кутепов А.М.* Общая химическая технология: учеб. для техн. вузов. - 2-е изд., испр. и доп. / А.М. Кутепов, Т.И. Бондарева, М.Г. Беренгартен. — М.: Высшая школа, 1990. — 520 с.
47. *Островский Г.М.* Оптимизация химико-технологических процессов. Теория и практика / Г.М. Островский, Т.А. Бережинский. - М.: Химия, 1984. — 240 с.
48. *Пазухин Э.М.* Топливо на верхних отметках разрушенного 4-го блока ЧАЭС. Уточнение сценария образования полихромной керамики / Э.М. Пазухин, А.С. Лагуненко, В.А. Краснов, В.В. Билько // «Радиохимия» на сайте НПО «Радиовый институт им. В.Г. Хлопина». — 2006. - Т.48. - Вып. 5.— С. 470; <http://www.khlopin.ru/radchem/2006-5.pdf>
49. *Пантелеев А.В.* Методы оптимизации в примерах и задачах: учеб. пособие. - 2-е изд., исправл./ А.В. Пантелеев, Т.А. Летова. - М.: Высшая школа, 2005. — 544 с.
50. *Поляк Б.Т.* Введение в оптимизацию / Б.Т. Поляк. - М.: Наука, 1983. — 384 с.
51. *Рейлиз В.И.* Методы оптимизации: электронный учебник по дисциплине «Методы оптимизации» / В.И. Рейлиз. - Томск: ТНПУ. <http://109.123.146.125/97>
52. *Самарский А.А.* Математическое моделирование: идеи, методы, примеры. - 2-е изд., испр. / А.А. Самарский, А.П. Михайлов. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. — 320 с.
53. *Саулин Д.В.* Математическое моделирование химико-технологических систем: конспект лекций / Д.В. Саулин. — Пермь: Перм. гос. техн. ун-т., 2003. - 91 с.
54. *Тарасик В.П.* Математическое моделирование технических систем: учебник для вузов / В.П. Тарасик. - Минск: ДизайнПРО, 2004. — 640 с.
55. *Федорова С.А.* Основные этапы составления математических моделей. / С.А. Федорова. - Севастополь: СИЯЭиП, 2000. — 28 с.
56. *Федорова С.А.* Методические указания по математическому моделированию и применению ЭВМ в химической технологии для студентов заочной формы обучения / С.А. Федорова. - Севастополь: СИЯЭиП, 2003. — 68 с.
57. *Фрэнк Р.* Математическое моделирование в химической технологии / Р. Фрэнк. - М.: Химия, 1971. — 272 с.
58. Химико-технологические системы. Синтез, оптимизация, управление / Под ред. И.П. Мухленова. - Л.: Химия, 1986. - 424 с.
59. *Чермак И.* Динамика регулируемых систем в теплоэнергетике и химии / И. Чермак, В. Петерка, И. Заворка. - М.: Мир, 1972. — 623 с.
60. *Швец В.Ф.* Математическое моделирование и оптимизация в химической технологии / В.Ф. Швец // Статьи Соросовского Образовательного журнала в текстовом формате. - 1998.

61. *Яблонский Г.С.* Кинетические модели каталитических реакций / Г.С. Яблонский, В.И. Быков, А.Н. Горбань. - Новосибирск: Наука, 1983. – 253 с.
62. <http://articles.excelion.ru/science/biology>
63. http://dic.academic.ru/dic.nsf/enc_mathematics
64. <http://www.allbest.ru/>

Учебное издание

Федорова Светлана Александровна

**МОДЕЛИРОВАНИЕ
ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ.
Конспект лекций**

Учебное пособие

В авторской редакции

Изд. № 92/2022. Объем 11,5 п.л. Усл. печ. л. 10,69. Уч.-изд. л. 11,27.
РИИЦМ ФГАОУ ВО «Севастопольский государственный университет»