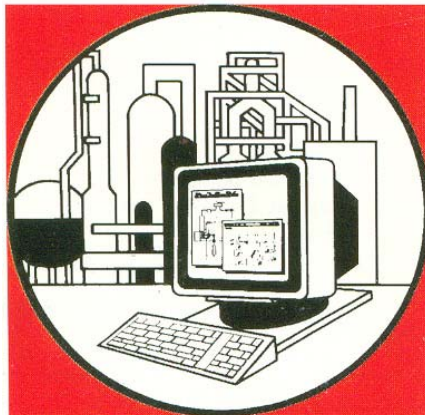


**С.И. Дворецкий, А.Ф. Егоров,  
Д.С. Дворецкий**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРО-  
ЦЕССОВ И ОБОРУДОВАНИЯ**



**Издательство ТГТУ**

Министерство образования Российской Федерации  
Тамбовский государственный технический университет

**С.И. Дворецкий, А.Ф. Егоров,  
Д.С. Дворецкий**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРО-  
ЦЕССОВ И ОБОРУДОВАНИЯ**

Рекомендовано УМО по химико-технологическому образованию  
в качестве учебного пособия для студентов  
высших учебных заведений

**Тамбов**  
**Издательство ТГТУ**  
**2003**

УДК 3966-01я73-1  
ББК 51.001.57  
Д243

**Рецензенты:**

Доктор технических наук, профессор РХТУ им. Д.И. Менделеева  
*Л.С. Гордеев*

Доктор технических наук, профессор ТГУ им. Г.Р. Державина  
*А.А. Арзамасцев*

**Дворецкий С.И., Егоров А.Ф., Дворецкий Д.С.**

Д243 Компьютерное моделирование и оптимизация технологических процессов и оборудования: Учеб.  
пособие. Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 2003. 224 с.  
ISBN 5-8265-0213-4

Учебное пособие посвящено компьютерному моделированию и оптимизации технологических процессов и оборудования в био-, химической и пищевой технологиях. Рассмотрены общие подходы и методология компьютерного моделирования и оптимизации в условиях неопределенности исходной информации. Дана классификация моделей и методов их построения, приводятся примеры вывода уравнений математических моделей конкретных процессов и аппаратов био-, химической и пищевой технологий. Особое внимание в пособии уделено аналитическому методу построения моделей и методологии имитационного моделирования. Обсуждаются постановки одно- и двухэтапных задач оптимизации технологических процессов и аппаратов с вероятностными и "жесткими" ограничениями при наличии неопределенности отдельных параметров модели и режимных переменных. Приводятся методы и алгоритмы их решения.

Учебное пособие предназначено для студентов очного и заочного отделений и магистрантов направлений: 665400 – Энерго- и ресурсосберегающие процессы в химической технологии, нефтехимии и биотехнологии, 655800 – Пищевая инженерия, 551800 – Технологические машины и оборудование.

УДК з966-01я73-1  
ББК 51.001.5

ISBN 5-8265-0213-4

© Тамбовский государственный  
технический университет  
(ТГТУ), 2003  
© Дворецкий С.И., Егоров А.Ф.,  
Дворецкий Д.С., 2003

**Учебное издание**

**Дворецкий Станислав Иванович,  
Егоров Александр Федорович,  
Дворецкий Дмитрий Станиславович**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И  
ОПТИМИЗАЦИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ  
ПРОЦЕССОВ И ОБОРУДОВАНИЯ**

**Учебное пособие**

Редактор В.Н. Митрофанова  
Компьютерное макетирование Е.В. Кораблевой

Подписано к печати 27.11.2003  
Формат 60 × 84/16. Бумага офсетная. Печать офсетная  
Объем: 13,02 усл. печ. л.; 13,00 уч.-изд. л.  
Тираж 250 экз. С. 789

Издательско-полиграфический центр ТГТУ  
392000, Тамбов, Советская, 106, к. 14

## Введение

Компьютерное моделирование – один из самых мощных инструментов познания, анализа и проектирования, которым располагают специалисты, ответственные за разработку и функционирование сложных химических, био- и пищевых технологий и производств. Идея компьютерного моделирования проста и в то же время интуитивно привлекательна. Она дает возможность инженеру (исследователю) экспериментировать с объектами в тех случаях, когда делать это на реальном объекте практически невозможно или нецелесообразно. Сущность методологии компьютерного моделирования состоит в замене исходного технологического объекта его "образом" – математической моделью – и в дальнейшем изучении модели с помощью реализуемых на компьютерах вычислительно-логических алгоритмов. Этот метод познания, конструирования, проектирования сочетает в себе достоинства как теории, так и эксперимента. Работа не с самим объектом (явлением, процессом), а с его 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) [1].

Современные промышленные объекты химической, био- и пищевой технологий состоят из большого количества взаимосвязанных подсистем, между которыми существуют отношения соподчиненности в виде трехуровневой иерархической структуры. Первый уровень образуют типовые процессы химической, био- и пищевой технологий с определенным аппаратным оформлением (механические, гидродинамические, тепловые, диффузионные, био- и химические процессы) и локальные системы автоматического управления ими. Основу второго уровня иерархии составляют производственные цеха и системы автоматизированного управления цехами. Цех представляет собой совокупность отдельных технологических процессов, аппаратов и систем автоматического контроля и управления ими. Третий, высший уровень иерархической структуры предприятия химической, био- и пищевой технологий – это системы организации, оперативного планирования и управления всем производством. На этом уровне возникают задачи ситуационного анализа и оптимального управления всем предприятием (совокупностью всех цехов).

Основу современного кибернетического подхода к решению задач химической, био- и пищевой технологий составляет системный анализ, в соответствии с которым задачи исследования, анализа и расчета отдельных технологических процессов, компьютерного моделирования и оптимизации сложных химических, био- и пищевых систем, оптимального проектирования технологических комплексов решаются тесной связи друг с другом, объединены общей стратегией и подчинены единой цели – созданию высокоэффективного производства [2].

Сущность системного анализа определяется его стратегией, в основе которой лежат общие принципы, применимые к решению любой системной задачи. К ним можно отнести четкую формулировку цели исследования, постановку задачи по достижению заданной цели и определение критерия эффективности решения задачи; разработку развернутой стратегии исследования с указанием основных этапов и направлений в решении задачи: последовательно-параллельное продвижение по всему комплексу взаимосвязанных этапов и возможных направлений; организацию последовательных приближений и повторных циклов исследований на отдельных этапах; принцип нисходящей иерархии анализа и восходящей иерархии синтеза при решении составных частных задач.

Центральным понятием системного анализа является понятие системы, т.е. объекта, взаимодействующего с внешней средой и обладающего сложным внутренним строением, большим числом составных частей и элементов. Элемент системы – самостоятельная и условно неделимая единица. Совокупность элементов и связей между ними образует структуру системы. Элементы взаимодействуют между собой и окружающей средой, иначе говоря, между ними существует материальная, энергетическая и информационная связь. Расчленение системы на подсистемы позволяет вскрыть иерархию структуры и рассматривать систему на разных уровнях ее детализации. Сложность системы определяется сложностью ее структуры, количеством элементов и связей, числом уровней иерархии, объемом информации, циркулирующей в системе. Система характеризуется алгоритмом функционирования, направленным на достижение определенной цели.

Формализация системы осуществляется с помощью математической модели, отображающей связь между выходными переменными системы, параметрами состояния и входными управляющими и возмущающими воздействиями. Сложная система обычно формализуется как детерминированно-стохастическая модель. С позиций системного анализа решаются задачи компьютерного моделирования, оптимизации, управления и оптимального проектирования био, химических и пищевых технологических систем в масштабе цеха, предприятия. Сущность системного подхода состоит в том, что вся информация, получаемая в лабораториях, на опытно-промышленных установках, последовательно накапливается и обогащается в процессе разработки полной математической модели технологической системы, которая затем используется для оптимизации того или иного производства.

Компьютерное моделирование есть процесс конструирования модели реального объекта (системы) и постановки вычислительных экспериментов на этой модели с целью либо понять (исследовать) поведение этой системы, либо оценить различные стратегии (алгоритмы), обеспечивающие функционирование данной системы. Таким образом, процесс компьютерного моделирования включает и конструирование модели, и ее применение для решения поставленной задачи: анализа, исследования, оптимизации или синтеза (проектирования) технологических процессов и оборудования. Все эти задачи чрезвычайно сложны и включают в себя почти бесконечное число элементов, переменных, параметров, ограничений и т.д. Пытаясь построить точную модель, мы могли бы попытаться включить все эти элементы (явления) и потратить уйму времени, собирая мельчайшие факты, касающиеся любой ситуации, и устанавливая связи между ними. Сходство модели с объектом, который она отображает, называется степенью изоморфизма. Для того, чтобы быть изоморфной, модель должна удовлетворять двум условиям: 1) должно существовать однозначное соответствие между элементами модели и элементами представляемого объекта; 2) должны быть сохранены точные соотношения или взаимодействия между элементами.

Степень изоморфизма модели относительна, и большинство моделей скорее гомоморфны, чем изоморфны. Под гомоморфизмом мы понимаем сходство по форме при различии основных структур, причем имеет место лишь поверхностное подобие между различными группами элементов модели и объекта. Гомоморфные модели являются результатом процессов упрощения и абстракции.

Основой успешной методики компьютерного моделирования должна быть тщательная отработка моделей. Обычно, начав с очень простой модели, постепенно продвигаются к более совершенной ее форме, отражающей сложную ситуацию более точно. Аналогии и ассоциации с хорошо построенными структурами, по-видимому, играют важную роль в определении отправной точки этого процесса совершенствования и отработки деталей. Этот процесс совершенствования и отработки связан с учетом постоянного процесса взаимодействия и обратной связи между реальной ситуацией и моделью. Между процессом модификации модели и процессом обработки данных, генерируемых реальным объектом, имеет место непрерывное взаимодействие. Таким образом, искусство моделирования состоит в способности анализировать проблему, выделять из нее путем абстракции ее существенные черты, выбирать и должным образом модифицировать предположения, характеризующие систему, а затем отрабатывать и совершенствовать модель до тех пор, пока она не станет давать полезные для практики результаты.

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. Искусством моделирования могут овладеть те, кто обладает оригинальным мышлением, изобретательностью и находчивостью, равно как и глубокими знаниями систем и физических явлений, которые необходимо моделировать.

## **ОБЩИЕ СВЕДЕНИЯ О МОДЕЛЯХ И**

## **КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ**

Изучая сложные технологические объекты, процессы, аппараты и физико-химические явления, мы не можем учесть все факторы: какие-то оказываются существенными, а какими-то можно пренебречь. При этом формируется модель объекта исследования. 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

следования модели, имеющего соответствующую программную поддержку, может быть представлена в следующем виде (рис. 1.1).

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) формализация объекта (построение модели) – переход от реального объекта к некоторой логической схеме (абстрагирование);
- 3) подготовка данных – отбор данных, необходимых для построения модели, и представление их в соответствующей форме;
- 4) разработка моделирующего алгоритма и программы ЭВМ;
- 5) оценка адекватности – повышение до приемлемого уровня степени уверенности, с которой можно судить относительно корректности выводов о реальном объекте, полученных на основании обращения к модели;



Рис. 1.1 Схема организации процесса компьютерного моделирования

- 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 с целью получения желаемых данных и анализа чувствительности;
- 9) интерпретация – построение выводов по данным, полученным путем имитации;
- 10) реализация – практическое использование модели и результатов моделирования;
- 11) документирование – регистрация хода осуществления процесса и его результатов, а также документирование процесса создания и использования модели.

Перечисленные этапы создания и использования модели определены в предположении, что задача может быть решена наилучшим образом с помощью компьютерного моделирования. Однако, это может быть не самый эффективный способ. В том случае, если задача может быть сведена к простой модели и решена *аналитически* нет никакой нужды в компьютерном моделировании и имитации. Следует изыскивать все возможные средства, подходящие для решения данной конкретной задачи, стремясь при этом к оптимальному сочетанию стоимости и желаемых результатов. Прежде чем приступать к оценке возможностей имитации, следует самому убедиться, что простая аналитическая модель для данного случая не пригодна.

### 1.1 Методология компьютерного моделирования

В представленной на рис. 1.1 схеме организации процесса компьютерного моделирования (имитации) основная цепочка (реальный технологический объект (система) – математическая модель – моделирующий алгоритм – программа ЭВМ – вычислительный эксперимент) соответствует традиционной

схеме, но во главу угла теперь ставится понятие триады: *модель – алгоритм – программа* (блоки 4, 5, 6), стратегическое и тактическое планирование вычислительного эксперимента (блок 7), интерпретация и документирование его результатов (блок 8).

На первом этапе построения ММ выбирается (или строится) "эквивалент" технологического объекта, отражающий в математической форме важнейшие его свойства – законы, которым он подчиняется, связи, присущие составляющим его элементам, и т.д. Математическая модель (или ее фрагменты) исследуется теоретическими методами, что позволяет получить важные предварительные знания об объекте (блоки 1, 2, 3).

Второй этап связан с разработкой метода расчета сформулированной математической задачи, или, как говорят, вычислительного или моделирующего алгоритма. Фактически он представляет собой совокупности алгебраических формул, по которым ведутся вычисления, и логических условий, позволяющих установить нужную последовательность применения этих формул. Вычислительные алгоритмы должны не искажать основные свойства модели и, следовательно, исходного технологического объекта, быть экономичными и адаптирующимися к особенностям решаемых задач и используемых компьютеров.

Как правило, для одной и той же математической задачи можно предложить множество вычислительных алгоритмов. Однако, требуется построение эффективных вычислительных методов, которые позволяют получить решение поставленной задачи с заданной точностью за минимальное количество действий (арифметических, логических), т.е. с минимальными затратами машинного времени. Эти вопросы весьма существенны и составляют предмет теории численных методов.

Вычислительный эксперимент имеет "многовариантный" характер. Действительно, решение любой прикладной задачи зависит от многочисленных входных переменных и параметров. Например, если рассчитывается химико-технологическая установка, то имеется множество различных режимных переменных и конструктивных параметров, среди которых нужно определить их оптимальный набор, обеспечивающий эффективное функционирование этой установки. Получить решение соответствующей математической задачи в виде формулы, содержащей явную зависимость от режимных переменных и конструктивных параметров, для реальных задач, как говорилось выше, не удастся. При проведении вычислительного эксперимента каждый конкретный расчет проводится при фиксированных значениях переменных и параметров. Проектируя оптимальную установку, т.е. определяя в пространстве переменных и параметров точку, соответствующую оптимальному режиму, приходится проводить большое число расчетов однотипных вариантов задачи, отличающихся значениями некоторых переменных или параметров. Поэтому очень важно опираться на эффективные численные методы.

Третий этап – создание программы для реализации разработанного моделирующего алгоритма на ЭВМ (создание компьютерной модели). Применение языков программирования СИ++, Паскаль и других порождает ряд проблем, из которых главными являются трудоемкость и недостаточная гибкость. В процессе исследования реальных систем часто приходится уточнять модели, что влечет за собой перепрограммирование моделирующего алгоритма. Ясно, что процесс моделирования в этом случае не будет эффективным, если не обеспечить его гибкости. Для этой цели можно использовать формальные схемы, описывающие классы математических моделей из определенной предметной области, поскольку программировать тогда нужно функционирование данной схемы, а не описываемые ею частные модели.

Создав *триаду* "модель – алгоритм – программа", исследователь получает в руки универсальный, гибкий и сравнительно недорогой инструмент, который вначале отлаживается, тестируется в "пробных" вычислительных экспериментах. После того как *адекватность* триады исходному технологическому объекту удостоверена, с моделью можно проводить разнообразные "опыты", дающие все требуемые качественные и количественные свойства и характеристики объекта. Процесс компьютерного моделирования сопровождается улучшением и уточнением, по мере необходимости, всех звеньев триады.

Обратимся теперь к блоку 7. Вычислительный эксперимент – это собственно проведение расчетов на ЭВМ и получение информации, представляющей интерес для исследователя. Конечно, точность этой информации определяется достоверностью, прежде всего модели, моделирующего алгоритма и программы ЭВМ. Именно по этой причине в серьезных прикладных исследованиях никогда не начинают вести полномасштабные расчеты сразу же по только что написанной программе. Им всегда предшествует период проведения тестовых расчетов. Они необходимы не только для того, чтобы "отладить" программу, т.е. отыскать и исправить все ошибки и опечатки, допущенные как при создании алгоритма, так



и при его программной реализации. В этих предварительных расчетах тестируется также сама математическая модель, выясняется ее адекватность исследуемому объекту. Для этого проводится расчет некоторых контрольных экспериментов, по которым имеются достаточно надежные измерения. Сопоставление этих данных с результатами расчетов позволяет уточнить математическую модель, обрести уверенность в правильности предсказаний, которые будут получены с ее помощью.

Только после проведения длительной кропотливой работы в вычислительном эксперименте наступает фаза прогноза (имитации) – с помощью компьютерной модели предсказывается поведение исследуемого объекта в условиях, где натурные эксперименты пока не проводились или где они вообще невозможны.

Важное место в вычислительном эксперименте занимает обработка результатов расчетов, их всесторонний анализ и, наконец, выводы (блок 8). Эти выводы бывают в основном двух типов: или становится ясна необходимость уточнения модели, или результаты, пройдя проверку, передаются заказчику (блок 9). При оптимизации или проектировании технологического объекта из-за сложности и высокой размерности математической модели проведение расчетов по описанной выше схеме может оказаться чересчур дорогим. И здесь идут на упрощение модели, на построение своего рода инженерных методик (формул), но опирающихся на сложные модели и расчеты и дающих возможность получить необходимую информацию значительно более дешевым способом. При этом проводится огромная предварительная работа по анализу сложных моделей, квинтэссенцией которой и являются простые на первый взгляд формулы.

При массовом использовании методов компьютерного моделирования в технических проектах следует добиваться резкого сокращения сроков разработки моделей, обеспечивающих различные этапы проектирования. Решение этой задачи возможно при соответствующем уровне развития технологии и компьютерного моделирования.

Технология компьютерного моделирования является основой целенаправленной деятельности, смысл которой состоит в обеспечении возможности фактического эффективного выполнения на ЭВМ исследований функционирования сложных систем. С ее помощью организуются действия исследователя на всех этапах его работы с моделями, начиная от изучения предметной области и выделения моделируемой проблемной ситуации и кончая построением и реализацией компьютерных экспериментов для анализа поведения системы.

Говоря о технологии моделирования, следует отметить два важных аспекта:

1) методологическую составляющую технологии как науки, занимающейся выявлением закономерностей, применение которых на практике позволяет находить наиболее эффективные и экономичные приемы компьютерного моделирования объектов (систем) на ЭВМ;

2) прикладные цели и задачи технологии как искусства, мастерства, умения достигать в ходе компьютерного моделирования сложных объектов практически полезных результатов.

## **1.2 Определение понятия "модель" и классификация моделей**

В общем случае модель является представлением объекта, системы или понятия (идеи) в некоторой форме, отличной от формы их реального существования. Модель какого-либо объекта может быть или точной копией этого объекта, или отображать некоторые характерные свойства объекта в абстрактной форме. Модель служит обычно средством, помогающим нам в объяснении, понимании или совершенствовании системы. Можно указать, по крайней мере, пять узаконенных и ставших привычными случаев применения моделей в качестве:

- 1) средства осмысления действительности;
- 2) средства общения;
- 3) средства обучения и тренажа;
- 4) инструмента прогнозирования;
- 5) средства постановки экспериментов.

Иными словами, модель может служить для достижения одной из двух основных целей: либо описательной, если модель служит для объяснения и (или) лучшего понимания объекта; либо предписывающей, когда модель позволяет предсказать и (или) воспроизвести характеристики объекта, опреде-

ляющие его поведение. Модель предписывающего типа обычно является и описательной, но не наоборот.

Прежде чем начать разработку модели, необходимо понять, что собой представляют структурные элементы, из которых она строится. В самом общем виде структуру модели математически можно представить в виде

$$E = \Phi(y, x, a, \xi),$$

где  $E$  – результат действия системы;  $x = (x_1, x_2, \dots, x_m)$  – вектор входных переменных, которыми мы можем управлять;  $y = (y_1, y_2, \dots, y_n)$  – вектор переменных состояния (когда они характеризуют состояние или условия, имеющие место в объекте (системе)) или выходных переменных (когда речь идет о выходах системы);  $a = (a_1, a_2, \dots, a_l)$  – вектор внутренних параметров объекта (системы);  $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_k)$  – вектор неопределенных параметров (часть входных переменных и внутренних параметров системы, значения которых мы не знаем точно) и возмущающих воздействий.

Компонентами векторов  $x$  и  $y$  являются расходы и составы потоков веществ, концентрации веществ, температура, давление в потоках, и т.п., компонентами вектора  $a$  – коэффициенты и параметры, характеризующие свойства перерабатываемых веществ, физико-химические процессы в системе (константы скоростей химических реакций, коэффициенты тепло- и массообмена, диффузии и т.п.), геометрические размеры и конструктивные особенности технологического оборудования.

В зависимости от масштаба технологической системы и наших предположениях о его свойствах математические модели (ММ) принимают конкретный вид. Можно говорить о ММ технологической машины или аппарата, технологического процесса, производства, предприятия и даже целой отрасли. Эти ММ отличаются одна от другой полнотой учета и глубиной описания различных процессов в системе, а также размерностями векторов  $y$ ,  $x$ ,  $a$ ,  $\xi$  и вектор-функций  $\Phi$  их связи  $E = \Phi(y, x, a, \xi)$ . Если, например, ММ аппарата содержит чаще всего не более 10 – 15 уравнений, то в модель производства, предприятия и тем более отрасли может входить несколько десятков или сотен уравнений.

Функциональные зависимости  $\Phi$  описывают поведение переменных и внутренних параметров в пределах компонента системы или выражают соотношения между компонентами системы. Эти соотношения, или операционные характеристики, по своей природе являются либо детерминированными, либо стохастическими. Детерминированные соотношения – это тождества или определения, которые устанавливают зависимость между определенными переменными или параметрами системы в тех случаях, когда процесс на выходе системы однозначно определяется заданной информацией на входе. В отличие от этого стохастические соотношения представляют собой такие зависимости, которые при заданной входной информации дают на выходе системы неопределенный результат. Оба типа соотношений обычно выражаются математическими уравнениями, которые устанавливают зависимость между переменными состояния (выходными) системы  $y$ , ее входными переменными  $x$ , внутренними параметрами системы  $a$  и возмущающими воздействиями (неопределенными параметрами)  $\xi$ . Обычно эти соотношения строятся на основе гипотез или выводятся с помощью статистического или математического анализа.

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).

Целевая функция или критерий  $E$  – это точное отображение целей или задач системы и необходимых правил оценки их выполнения. Можно указать два типа целей: сохранение и приобретение. Цели сохранения связаны с сохранением или поддержанием каких-либо ресурсов (временных, энергетических, творческих и т.д.) или состояний (безопасности, комфорта, качественных показателей выпускаемой продукции и т.д.). Цели приобретения связаны с приобретением новых ресурсов (прибыли, более высокого качества, заказчиков и т.п.) или достижением определенных состояний, к которым стремится предприятие или руководитель (завоевание части рынка, повышение уровня занятости, экологической безопасности и т.п.). Целевая функция (критерий) обычно является органической составной частью мо-

дели, и весь процесс манипулирования с моделью направлен на удовлетворение или улучшение заданного критерия.

Модели можно классифицировать различными способами, хотя ни один из них не является полностью удовлетворительным. Укажем некоторые типовые группы моделей:

- 1) натурные, аналоговые, символические;
- 2) экспериментальные (регрессионные) и аналитические;
- 3) статические и динамические;
- 4) детерминированные и стохастические;
- 5) дискретные и непрерывные.

Различие ММ обуславливается их назначением: исследование эффективности режимов функционирования технологических объектов; оптимизация установившихся (статических) и переходных (динамических) режимов их работы; оптимальное проектирование технологических объектов и управление ими. Структура и вид уравнений ММ зависят от свойств объекта.

Поведение технологического объекта с сосредоточенными координатами  $y, x$  в статике и неизменными во времени  $t$  свойствами (стационарный объект) описывается уравнениями ММ вида

$$F[y, x, a, \xi] = 0 \quad \text{или} \quad y = f(x, a, \xi).$$

ММ статики нестационарного объекта с сосредоточенными координатами (квазистатическая модель) представляет собой систему уравнений вида

$$F[y, x, a(t), \xi] \approx 0, \quad \frac{da}{dt} = f_1(y, a, \xi).$$

Поведение технологического объекта с сосредоточенными координатами  $y, x$  в динамике и неизменными во времени  $t$  свойствами описывается уравнениями ММ вида

$$F\left[\frac{dy}{dt}, y(t), x(t), a, \xi\right] = 0 \quad \text{или} \quad \frac{dy}{dt} = f(y(t), x(t), a, \xi).$$

ММ динамики нестационарного объекта с сосредоточенными координатами представляет собой систему уравнений вида

$$F\left[\frac{dy}{dt}, x(t), a(t), \xi\right] \approx 0, \quad \frac{da}{dt} = f_1(y(t), a, \xi).$$

Если координаты объекта  $x, y$  распределены по пространственной переменной  $l$  (длина, радиус, высота) и его свойства неизменны во времени  $t$ , то мы имеем дело со стационарными ММ статики или динамики технологического объекта с распределенными координатами, которые имеют вид, соответственно:

$$F\left[\frac{dy}{dl}, y(l), x(l), a(l), \xi\right] = 0, \quad F\left[\frac{\partial y}{\partial t}, \frac{\partial y}{\partial l}, y(t, l), x(l), a(l), \xi\right] = 0.$$

По структуре  $F$  ММ технологических объектов разделяются на линейные и нелинейные. Решение  $y(x, a)$  системы уравнений ММ, линейной по  $y$ , удовлетворяет следующим условиям (принципу суперпозиции):

- 1) аддитивности  $y(x_1 + x_2, a) = y(x_1, a) + y(x_2, a)$ ;
- 2) однородности  $y(c \times x, a) = c \times y(x, a)$ ;

где  $x_1$  и  $x_2$  – произвольные функции  $t, l$  или некоторые числа;  $c$  – любое вещественное число.

Решение  $y(x, a)$  называется линейным по  $a$ , если

$$y(x, a_1 + a_2) = y(x, a_1) + y(x, a_2); \text{ и } y(x, c \times a) = c \times y(x, a),$$

где  $a_1, a_2$  – произвольные параметры ММ.

Если для некоторой ММ не выполняется хотя бы одно из условий принципа суперпозиции, то она относится к классу нелинейных.

Математические модели технологических объектов химической, пищевой и микробиологической промышленности чаще всего описываются *нелинейными* уравнениями.

Выше мы определили компьютерное моделирование как процесс создания модели реального технологического объекта и проведения с этой моделью вычислительных экспериментов с целью осмысления поведения объекта, оптимизации его режимов или оценки различных стратегий управления этим объектом. Согласно этому определению, модель должна быть связана с функционированием объекта, ориентирована на решение поставленной задачи (целеобусловлена) и построена так, чтобы служить подспорьем тем, кто проектирует объект или управляет режимами его функционирования. Функционирование объекта представляет собой совокупность координированных действий, необходимых для достижения заданной цели или решения определенной задачи. С этой точки зрения технологическим объектам, которыми мы интересуемся, свойственна целенаправленность. Это обстоятельство требует от нас при моделировании технологического объекта обратить самое пристальное внимание на цели и задачи, которые должен решать данный технологический объект.

Сформулируем теперь конкретные критерии, которым должна удовлетворять "хорошая" модель. Такая модель должна быть: 1) простой и понятной пользователю; 2) целенаправленной; 3) надежной в смысле гарантии от абсурдных ответов; 4) удобной в управлении и обращении; 5) полной с точки зрения возможностей решения поставленных задач; 6) адаптивной, т.е. позволяющей легко переходить к другим модификациям или обновлять данные; 7) допускающей постепенные изменения в том смысле, что будучи вначале простой, она может во взаимодействии с пользователем становится все более сложной и точной.

Необходимость большинства этих критериев совершенно очевидна, но они будут рассмотрены более полно в последующих разделах настоящего пособия, посвященных вопросам организации и руководства работами по компьютерному моделированию.

## ПРИМЕРЫ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

1 *Модель периодического процесса растворения смеси полидисперсных частиц* [3]. Предположим, что начальные значения массы непористых сферических частиц различны, растворение частиц не сопровождается тепловым эффектом, а кинетика растворения описывается уравнением вида

$$\frac{dm}{dt} = f(m, c_y) = -k_p \chi (c_{yn} - c_y) m^{2/3}, \quad m(0) = m_0, \quad (1.1)$$

где  $m$  – масса частицы,  $c_{yn}, c_y$  – концентрация насыщения и фактическая концентрация основной массы раствора,  $\chi$  – коэффициент формы частицы (для шарообразной частицы  $\chi = \sqrt[3]{36 \pi / \rho^2}$ ).

**Исходные данные:** плотность распределения  $P(m_0)$  массы  $m_0$  частиц в начальный момент времени, начальная масса  $M_0$  частиц, загруженных в аппарат, объем  $V_y$  растворителя в аппарате, концентрация  $c_y$  раствора в начальный момент времени, константа  $k_p$  растворения и концентрация  $c_{yn}$  насыщения.

Требуется построить математическую модель, позволяющую по исходным данным рассчитывать зависимости концентраций  $c_y(t)$  раствора и общей массы  $M_0(t)$  нерастворившихся частиц от времени.

Запишем уравнение кинетики состояния среды, которое при сделанных выше допущениях сводится к уравнению материального баланса

$$V_y \frac{dc_y}{dt} = - \int_{(m_0)} \hat{P}_0(m_0) f[m(m_0, t), c_y] dm_0, \quad c_y(0) = c_y^0. \quad (1.2)$$

Поскольку масса вещества в растворе увеличивается только за счет уменьшения массы частиц при их растворении, то общая масса частиц, находящихся в аппарате в момент времени  $t$ , рассчитывается по формуле

$$M(t) = M_0 - V_y [c_y(t) - c_y(0)]. \quad (1.3)$$

Приведенная модель (1.1 – 1.3) периодического процесса растворения относится к классу динамических нелинейных моделей с сосредоточенными координатами. Для определения зависимости  $c_y(t)$  необходимо вначале одним из численных методов, например методом Рунге-Кутты четвертого порядка, решить нелинейное дифференциальное уравнение (1.2). После этого по соотношению (1.3) можно рассчитать  $M(t)$ .

Далее приведем модель непрерывного процесса растворения монодисперсных частиц [3]. Предположим, что на вход аппарата подаются частицы одинаковой массы  $m_0$ , их растворение не сопровождается тепловым эффектом, кинетика растворения частиц описывается уравнением (1.1).

**Исходные данные:**  $G_x^{\text{BX}}, G_y, m_0, c_y^{\text{BX}}$  – соответственно расходы твердой фазы и растворителя, масса отдельной частицы, концентрация раствора на входе в аппарат;  $k_p$  – константа растворения;  $c_{\text{yn}}$  – концентрация насыщения и  $V_y$  – объем растворителя, находящегося в аппарате.

Требуется построить математическую модель, позволяющую по исходным данным рассчитывать концентрацию  $c_y$  раствора и общую массу  $G_x^{\text{ВЫХ}}$  частиц, выгружаемых из аппарата в единицу времени.

Запишем уравнение материального баланса, описывающее состояние среды

$$G_y (c_y - c_y^{\text{BX}}) = \int_0^{m_0} \hat{P}[\alpha(m)] dm, \quad (1.4)$$

где  $\hat{P}(\alpha)$  – ненормированная плотность распределения возраста частиц  $\alpha$  в аппарате. Для режима идеального смешения имеем

$$\hat{P}(\alpha) = n_0 \exp(-\alpha/\Theta), \quad (1.5)$$

где  $\Theta = V_y/G_y$  – среднее время пребывания частиц в аппарате,  $n_0 = G_x^{\text{BX}}/M_0$  – число частиц поступающих в аппарат в единицу времени.

Массовый расход частиц, покидающих аппарат, можно определить из соотношения

$$G_x^{\text{ВЫХ}} = G_x^{\text{BX}} + G_y (c_y^{\text{BX}} - c_y). \quad (1.6)$$

Приведенная модель (1.1), (1.4) – (1.6) относится к классу статических нелинейных моделей с сосредоточенными координатами.

**2 Модель процесса сушки дисперсных материалов в неподвижном слое [4].** Анализ процесса сушки дисперсных материалов в неподвижном слое является основным элементом моделирования тепло- и массообмена в сушилках с перекрестным движением материала и сушильного агента.

Для описания кинетики сушки отдельной частицы принимается уравнение, соответствующее периоду постоянной скорости сушки при условии, что вся теплота, конвективно подводимая к поверхности влажной частицы, затрачивается на испарение влаги

$$-\frac{du}{d\tau} = \alpha F(t - t_m) / (V \rho_t r_c), \quad (1.7)$$

где  $F$ ,  $V$ ,  $\rho_t$  и  $u$  – площадь поверхности, объем, плотность и влагосодержание частицы;  $t$  – температура сушильного агента;  $\alpha$  – коэффициент теплоотдачи от сушильного агента к поверхности влажной частицы;  $r_c$  – теплота испарения;  $t_m$  – температура мокрого термометра.

Интегрирование уравнения (1.7) для сферической частицы диаметром  $d$  при начальном условии  $u|_{\tau=0} = u_0$  дает текущее значение влагосодержания частицы с учетом возможного изменения температуры сушильного агента  $t$  у ее поверхности

$$u = u_0 - \frac{6\alpha}{r_c \rho_T d} \int_0^\tau (t - t_M) d\tau. \quad (1.8)$$

Распределение температуры сушильного агента по высоте слоя материала (для определенности здесь полагается, что сушильный агент фильтруется через слой снизу вверх) определяется из уравнения теплового баланса для элементарного слоя высотой  $dh$  в предположении режима полного вытеснения при фильтрационном движении сушильного агента через слой

$$-cGdt = \alpha (t - t_M) [6(1 - \varepsilon) / d] dh. \quad (1.9)$$

Интегрирование уравнения (1.9) дает экспоненциальный профиль температуры сушильного агента по высоте  $h$  слоя порозностью  $\varepsilon$

$$t = t_M + (t_0 - t_M) \exp(-Bh). \quad (1.10)$$

В этих уравнениях  $B = 6\alpha(1 - \varepsilon)/(cGd)$ ,  $c$ ,  $G$  и  $t_0$  – теплоемкость расход и температура поступающего в слой сушильного агента.

С учетом стационарного распределения температуры (1.10) по формуле (1.8) получим значение влагосодержания материала на высоте слоя  $h$

$$u = u_0 - [6\alpha/(r_c \rho_T d)](t_0 - t_M) \exp(-Bh) \tau. \quad (1.11)$$

Величина среднего влагосодержания всего слоя материала высотой  $H$  находится интегрированием распределения (1.11) по высоте в пределах  $0 \leq h \leq H$ :

$$\bar{u} = \frac{1}{H} \int_0^H u dh = u_0 - \frac{cG(t_0 - t_M)}{r_c \rho_T (1 - \varepsilon) H} (1 - e^{-BH}) \tau. \quad (1.12)$$

Уравнения (1.11) и (1.12) описывают процесс сушки до момента времени  $\tau_*$ , когда нижний слой частиц достигает равновесного влагосодержания  $u_*$ . Значение  $\tau_*$  находится из распределения (1.11) при  $h = 0$  и  $u = u_*$ :

$$\tau_* = (u_0 - u_*) / [6\alpha(r_c \rho_T d)^{-1} (t_0 - t_M)]. \quad (1.13)$$

Текущее положение координаты фронта равновесного влагосодержания оказывается линейной функцией времени сушки

$$h_* = (\tau - \tau_*) / (B\tau_* + L), \quad (1.14)$$

где  $L = (1 - \varepsilon) \rho_T (c_T + c_B u_*) / (cG)$ .

Тогда профиль влагосодержания в пределах верхней влажной зоны описывается следующим выражением

$$u(h, t) = u_0 - (u_0 - u_*) \exp[-B(h - h_*)]. \quad (1.15)$$

Среднее по высоте слоя влагосодержание материала находится интегрированием выражения для постоянного  $u_*$  в диапазоне  $0 \leq h \leq h_*$ :

$$\begin{aligned}\bar{u}(\tau) &= \frac{1}{H} \left\{ \int_0^{h_*} u_* dh + \int_{h_*}^H [u_0 - (u_0 - u_*) e^{-B(h-h_*)}] dh \right\} = \\ &= u_0 - (u_0 - u_*) \left[ \frac{h_*}{H} + \frac{1}{BH} (1 - e^{-B(H-h_*)}) \right].\end{aligned}\quad (1.16)$$

Приведенная модель процесса (1.7) – (1.16) относится к классу динамических моделей с распределенными координатами.

**3 Математическая модель биосинтеза.** Микробиологический синтез (биосинтез) – это процесс, который протекает с участием микроорганизмов и сопровождается образованием биомассы. Целевым продуктом биосинтеза является либо сама биомасса, либо различные вещества, продуцируемые микроорганизмами в процессе их жизнедеятельности. Основные стадии процесса биосинтеза – рост микроорганизмов и накопление биомассы – происходит в ферментаторах, работающих чаще всего периодически. В них загружают питательную среду и засевную дозу микроорганизмов. Образовавшуюся культуральную жидкость интенсивно перемешивают. Однако, несмотря на перемешивание, культуральная жидкость не является однородной. Во-первых, клетки микроорганизмов могут объединяться, образуя агломераты; во-вторых, неоднородной является сама питательная среда: в ней могут содержаться диспергированные капли плохо растворимых углеводов и пузырьки газа. Кроме того, неодинаковыми могут быть и размеры клеток.

При моделировании периодического процесса биосинтеза при неоднородной биомассе предположим, что лимитирующий субстрат находится в питательной среде в растворенном виде, а биомасса, загружаемая в аппарат, представляет собой совокупность отдельных агломератов различной массы. Кинетика роста агломерата описывается уравнением

$$\frac{dm}{dt} = \frac{k_1 c_y}{k_2 + c_y} S = \frac{k_1 c_y}{k_2 + c_y} \chi m^{2/3}, \quad (1.17)$$

а скорость потребления субстрата агломератом клеток массой  $m$  равна

$$f_1[S(m), c_y] = \frac{k_3 c_y S}{k_2 + c_y} = \frac{k_3 c_y \chi m^{2/3}}{k_2 + c_y}. \quad (1.18)$$

**Исходные данные:** ненормированная плотность распределения массы  $\hat{P}(m_0)$  агломератов клеток в момент  $t = 0$ ; объем среды  $V_y$  (предполагается, что в ходе процесса он не изменяется); начальная концентрация субстрата  $c_y(0)$ , константы  $k_1, k_2, k_3$ ; коэффициент формы частиц  $\chi$ .

Требуется построить модель и рассчитать зависимости, описывающие изменение во времени концентрации  $c_y(t)$  субстрата и общей массы  $M(t)$  микроорганизмов.

Аналитическое решение уравнения (1.17) при начальных условиях  $m(0) = m_0$  имеет вид

$$m(t) = \left[ m_0^{1/3} + \frac{1}{3} \chi k_1 \int_0^t \frac{c_y(t_1)}{k_2 + c_y(t_1)} dt_1 \right]^3.$$

При сделанных предположениях скорость потребления субстрата агломератом клеток начальной массой  $m_0$  равна:

$$F_1(m_0, c_y) = f_1[m(m_0, t), c_y] = \frac{k_3 c_y \chi}{k_2 + c_y} \left[ m_0^{1/3} + \frac{1}{3} \chi k_1 \int_0^t \frac{c_y(t_1)}{k_2 + c_y(t_1)} dt_1 \right]^2.$$

Кинетика состояния среды описывается в этом случае уравнением материального баланса по лимитирующему субстрату

$$\begin{aligned}
V_y \frac{dc_y}{dt} &= \int_{(m_0)} \hat{P}_0(m_0) F_1(m_0, c_y) dm_0 = \\
&= -\frac{k_3 c_y \chi}{k_2 + c_y} \int_{(m_0)} \hat{P}_0(m_0) [m_0^{1/3} + \frac{1}{3} \chi k_1 \int_0^t \frac{c_y(t_1)}{k_2 + c_y(t_1)} dt_1]^2 dm_0.
\end{aligned}
\tag{1.19}$$

Изменение общей массы микроорганизмов можно найти с учетом того, что при сделанных допущениях рост массы клеток пропорционален уменьшению массы субстрата  $V_y \frac{dc_y}{dt} = -\frac{k_3}{k_1} \frac{dM(t)}{dt}$ , откуда

$$M(t) = M_0 - (k_3 / k_1) V_y [c_y(t) - c_y(0)]. \tag{1.20}$$

Уравнения (1.17) – (1.20) представляют собой математическое описание процесса биосинтеза для рассматриваемого случая. Расчет по модели сводится к решению нелинейного дифференциального уравнения (1.19), которое может быть получено численно. Численные значения интегралов находят, например, по формулам прямоугольников или Симпсона.

Приведенная модель относится к классу динамических нелинейных моделей с сосредоточенными координатами.

### 1.3 Общие сведения о методах построения математической модели технологических объектов

В процессе преобразования наших знаний о технологической системе в ее математическую модель мы должны определить: назначение модели; какие компоненты системы должны быть включены в состав модели; переменные и параметры, относящиеся к этим компонентам; функциональные соотношения  $F$ ,  $f$  между компонентами, параметрами и переменными.

Побочным результатом этой фазы общей ориентировки явится определение точной цели или назначения данной программы компьютерного моделирования. Вычислительные эксперименты проводятся с весьма разнообразными целями, в числе которых могут быть: оценка – определение, насколько хорошо технологическая система предлагаемой структуры будет соответствовать некоторым критериям; сравнение – сопоставление конкурирующих технологических систем; прогноз – оценка поведения системы при некотором предполагаемом сочетании рабочих условий; анализ чувствительности – выявление из большого числа действующих факторов тех, которые в наибольшей степени оказывают влияние на функционирование технологической системы; оптимизация – определение условий осуществления (режимов функционирования) технологических процессов в объекте или конструктивных параметров технологического объекта, при которых заданный критерий достигает экстремального значения.

Этот список никак нельзя считать исчерпывающим: в нем просто перечислены некоторые наиболее распространенные цели компьютерного моделирования. Четкое определение назначения модели оказывает существенное влияние на весь процесс ее конструирования и экспериментальной проверки.

После того как мы определили (по меньшей мер качественно) конкретную цель, для которой понадобилось создание модели, наступает этап определения необходимого состава компонентов модели. После составления полного списка компонентов для каждого из них решается вопрос, следует ли включить его в состав модели. Но сделать это трудно, поскольку на данном этапе разработки модели не всегда ясно, насколько важен тот или иной компонент для достижения общей цели моделирования. При этом необходимо уточнить: следует ли включить данный компонент в состав модели или же в состав окружающей среды?

Назначение компонентов системы состоит в том, чтобы преобразовывать входные сигналы в выходные. Имеются три разных вида компонентов, составляющих основные функциональные блоки сложных систем: 1) элементы преобразования, в которых один или несколько входных сигналов, будучи обработанными некоторым наперед заданным образом, преобразуются в один или несколько выходных сигналов; 2) элементы сортировки, в которых один или несколько входных сигналов распределя-



ются (сортируются) по двум или нескольким разным выходам; 3) элементы обратной связи, в которых выходной сигнал некоторым образом меняется в зависимости от входного сигнала.

При решении вопроса о том, какие компоненты надо включить, а какие исключить, важным соображением является число переменных, которое необходимо включить в модель. Определить число выходных переменных, как правило, не трудно, если хорошо проработан вопрос о целях и назначении исследования. Трудности возникают при определении, какие входные переменные и переменные состояния вызывают наблюдаемые эффекты и какими из этих переменных необходимо манипулировать, чтобы получить желаемые эффекты. К тому же здесь мы сталкиваемся с противоречием: с одной стороны, мы стремимся сделать модель как можно проще, чтобы облегчить ее понимание, упростить задачу ее конструирования и повысить эффективность компьютерного моделирования; с другой стороны, мы хотим получить как можно более точную модель. Следовательно, реальную технологическую систему необходимо упрощать до тех пор, пока это не приводит к существенной потере точности.

Коль скоро решено, какие компоненты и переменные мы включаем в нашу модель, необходимо далее определить функциональные связи между ними, а также значения используемых параметров. Здесь перед нами снова встают труднопреодолимые проблемы. Во-первых, может быть трудно (а то и просто невозможно) количественно определить или измерить некоторые переменные, важные для оценки поведения технологической системы. Во-вторых, соотношения между компонентами и переменными могут быть неопределенными. В-третьих, необходимая нам информация и числовые данные могут либо отсутствовать, либо быть в непригодном для использования виде. Все эти обстоятельства более подробно мы рассмотрим в следующих разделах пособия.

По методу составления уравнений (функциональных зависимостей  $F, f$ ) ММ их можно подразделить на формальные (эмпирические, регрессионные) и неформальные (аналитические). При построении эмпирических (регрессионных) ММ структура функциональных зависимостей  $F, f$  задается на основе некоторых формальных соображений, не имеющих связи с типом технологического объекта, его конструктивными особенностями, механизмами протекающих процессов. Задание  $F, f$  в формальных ММ производится с учетом удобства последующего использования уравнений или простоты определения вектора  $a$  по экспериментальным данным. Под удобством использования ММ понимается возможность получения аналитического решения  $y(x, a)$  или экономичного нахождения приближенного решения на ЭВМ.

Следует отметить, что формальные ММ применяют для описания стационарных и нестационарных объектов только с сосредоточенными координатами. При этом модели динамики всегда выбираются линейными, а уравнения статики задаются в таком виде, чтобы решение  $y(x, a)$  было линейным по  $a$ . Для составления таких моделей не требуется глубокого изучения объектов; необходимая точность описания достигается увеличением размерности вектора  $a$ .

При построении неформальных (аналитических) ММ функции  $F, f$  выводят на основе теоретического анализа физико-химических процессов, происходящих в технологическом объекте.

При выводе уравнений ММ технологических объектов учитывают: гидродинамические режимы перемещения веществ; скорости химических превращений, диффузии, передачи тепла, хемосорбции и т.д.; уравнения материального и энергетического (теплового) баланса; уравнения фазовых превращений и др. В функции  $F, f$  входят (в явной или косвенной форме) основные конструктивные размеры аппарата (поверхность теплообмена, диаметры и длины труб реакторов, объемы и число реакторов смешения и т.п.). Чем детальнее и полнее неформальная ММ, тем сложнее структура  $F, f$  и выше размерность вектора  $a$ , компонентами которого являются параметры уравнений кинетики (константы скоростей, энергии активации, коэффициенты тепло- и массоотдачи, диффузии и т.п.) и характеристики веществ (теплоемкости, плотности и т.д.).

В процессе вывода уравнений ММ приходится применять ряд допущений, например, об (не) учете некоторых физико-химических процессов, протекающих в технологическом объекте. Вследствие этого составлению ММ предшествует трудоемкий этап экспериментального исследования этих процессов на лабораторных установках с целью определения уравнений кинетики и оценки значимости скоростей этих процессов. В зависимости от принимаемых допущений ММ одного и того же технологического объекта могут иметь существенно различный вид. Тем более могут различаться структуры функций  $F, f$  неформальных ММ объектов разного типа.

Неформальные ММ технологических объектов, как правило, нелинейны, нахождение их приближенных решений  $y(x, a, \xi)$  обычно осуществляется численными методами на ЭВМ. Решения  $y(x, a, \xi)$  чаще всего нелинейны по  $a$ , что значительно затрудняет определение параметра по экспериментальным данным. Эти обстоятельства, а также большая трудоемкость лабораторных исследований процессов и вывода уравнений, сдерживают использование неформальных ММ.

Неформальные ММ технологических объектов содержат разнообразную и обширную информацию о конструкциях объектов, механизмах и скоростях протекающих в них физико-химических процессов. Это позволяет использовать неформальные ММ для исследования на ЭВМ технологических объектов, оптимизации режимов их работы, оптимального проектирования объектов, оптимального управления ими.

В зависимости от способа построения  $F, f$  и определения вектора параметров  $a$  можно указать три метода построения ММ технологических объектов (рис. 1.2): экспериментальный, аналитический и комбинированный [5].

При экспериментальном методе построения формальных ММ параметры  $a$  определяются по опытными данным  $y^3, x^3$ , полученным на действующем объекте.

Построенные этим методом ММ (будем называть их экспериментальными) не нуждаются в проверке на адекватность, но они справедливы только для того объекта, на котором проводились опыты.

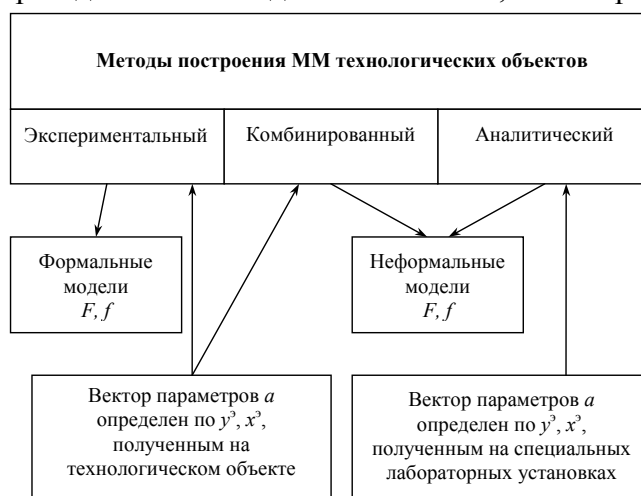


Рис. 1.2 Схема классификации методов построения математической модели

Аналитический метод построения ММ заключается в теоретическом расчете или определении параметра  $a$  неформальных уравнений статики и динамики по опытными данным  $y^3, x^3$ , которые получены при исследовании отдельных физико-химических процессов, происходящих в объекте, на лабораторных установках. В аналитических ММ параметр  $a$  имеет отчетливую физическую трактовку и представляет собой самостоятельную ценность, так как может быть использован в других задачах. Поэтому к задаче определения вектора параметра  $a$  предъявляют следующие требования: единственности  $a$ , устойчивости  $a$  к ошибкам измерения  $y^3$  и расчета; адекватности ММ объекту.

Комбинированный (экспериментально-аналитический) метод построения ММ заключается в нахождении параметра  $a$  неформальных уравнений статики и динамики по сигналам  $y^3, x^3$ , полученным на действующем объекте. Модели, полученные таким методом, назовем комбинированными. Параметр  $a$  в таких ММ имеет физическую трактовку, поэтому к задаче определения вектора  $a$  предъявляют те же требования, что и при аналитическом методе.

Математические модели, построенные экспериментальным и комбинированным методами, используются для оптимизации статических режимов действующего объекта и расчета систем автоматического регулирования. Аналитические модели можно применять для оптимального проектирования технологических объектов и конструирования систем автоматического управления ими.

## 2 Экспериментальный метод построения МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

Основным принципом моделирования технологических систем, содержащих стохастические или вероятностные элементы, является разыгрывание выборок по методу Монте-Карло. В этом методе данные предшествующего опыта вырабатываются искусственно путем использования некоторого генератора случайных чисел в сочетании с интегральной функцией распределения вероятностей для исследуемого процесса. Таким генератором может быть таблица, колесо рулетки, подпрограмма ЭВМ или какой-либо другой источник равномерно распределенных случайных чисел. Подлежащее разыгрыванию распределение вероятностей может быть основано на эмпирических данных или представлять собой известное теоретическое распределение. Случайные числа используются для получения дискретного ряда случайных переменных, имитирующего результаты, которые можно было бы ожидать в соответствии с разыгрываемым вероятностным распределением.

Способ применения метода Монте-Карло по идее довольно прост. Чтобы получить искусственную случайную выборку из совокупности величин, описываемую некоторой функцией распределения вероятностей, следует обеспечить возможность получения равномерно распределенных случайных чисел и далее использовать эти числа для генерации случайных величин с требуемыми характеристиками. Библиотеки программ большинства ЭВМ включают с этой целью специальные стандартные программы для наиболее распространенных законов распределения. При разработке имитационной модели, содержащей стохастические или вероятностные элементы, всегда возникает вопрос, следует ли при методе Монте-Карло применять непосредственно эмпирические данные или же нужно воспользоваться одним из теоретических распределений. Этот вопрос очень важен и фундаментален по трем причинам. Во-первых, при использовании "сырых" эмпирических данных подразумевается, что моделируется только прошлое. Данные полученные вчера, строго говоря, отображают лишь вчерашнее поведение системы; возможными событиями оказываются только те, что уже произошли. Следовательно, необходимо предположить, что основная форма распределения вероятностей останется неизменной во времени и что его особенности, относящиеся к определенному периоду времени, будут повторяться. Во-вторых, использование теоретического распределения в большинстве случаев дает лучшие результаты с точки зрения затрат машинного времени и требуемого объема памяти ЭВМ.

В-третьих, при использовании теоретического распределения гораздо легче изменять параметры генератора случайных чисел, когда требуется проверить чувствительность модели или "проиграть" на ней различные возможные ситуации. Поэтому целесообразно сразу же проверить, не согласуются ли имеющиеся эмпирические данные с известным теоретическим распределением (на статистически приемлемом доверительном уровне). Если да, то следует воспользоваться теоретическим распределением.

Для проверки совместимости экспериментальных данных (гистограмм) с некоторым теоретическим распределением исследователь подбирает одно или несколько теоретических распределений (например, нормальное, Пуассона, биномиальное, экспоненциальное, гамма-распределение и т.д.). После этого ему следует определить параметры распределения с тем, чтобы подвергнуть их проверке по статистическим критериям.

Для статистической оценки гипотезы о том, что совокупность эмпирических, или выборочных данных незначительно отличается от той, которую можно ожидать при некотором теоретическом законе распределения, применяется критерий "хи-квадрат", предложенный Пирсоном. В этом случае статистика  $\chi^2$  определяется выражением

$$\chi^2 = \sum (f_0 - f_1)^2 / f_1,$$

где  $f_0$  – наблюдаемая частота для каждой группы или интервала;  $f_1$  – ожидаемая частота для каждой группы или интервала;  $\sum$  – предсказанная теоретическим распределением сумма по всем группам или интервалам.

Если  $\chi^2 = 0$ , то наблюдаемые и теоретически предсказанные значения частот точно совпадают; если  $\chi^2 > 0$ , то полного совпадения нет. В последнем случае мы должны сравнивать наши расчетные значения с табличными (критическими) значениями  $\chi^2$ , полученными Фишером для различных чисел степе-

ней свободы и уровней доверительной вероятности  $1-\alpha$ . При практическом использовании этой статистики высказывается так называемая нулевая гипотеза  $H_0$  о том, что между наблюдаемым и ожидаемым теоретическим распределением с теми же параметрами нет значительных расхождений. Если расчетная величина  $\chi^2$  оказывается больше критического табличного значения, то можно заключить, что при данном уровне доверительной вероятности наблюдаемые частоты значительно отличаются от ожидаемых, и тогда следовало бы отвергнуть гипотезу  $H_0$ .

Еще один широко используемый критерий для статистической проверки гипотез был предложен Смирновым и Колмогоровым. Он применяется в тех случаях, когда применяемое распределение непрерывно. Проверка осуществляется путем задания интегральной функции, следующей из теоретического распределения, и ее сравнения с интегральной функцией распределения эмпирических данных. Сравнение основывается на выборочной группе, в которой экспериментальное распределение имеет наибольшее абсолютное отклонение от теоретического. Далее эта абсолютная разность сопоставляется с критическими значениями с целью определения, может ли такое отклонение быть случайным при данном законе распределения.

Естественно возникает вопрос, когда следует пользоваться критерием  $\chi^2$ , а когда критерием Смирнова-Колмогорова? При относительно малых объемах выборок критерий  $\chi^2$  вообще неприменим и следует пользоваться критерием Смирнова-Колмогорова. Однако, если объем выборки велик, предпочтителен, по всей вероятности, критерий  $\chi^2$ .

Во многих подсистемах технологического объекта имеет место функциональная связь между двумя или более переменными, и желательно эту связь выявить. Чаще всего эта связь чрезвычайно сложна или совершенно не известна. В таких случаях мы можем столкнуться с необходимостью ввести некоторую гипотезу о характере функциональной зависимости, т.е. аппроксимировать ее некоторым относительно простым математическим выражением, например, многочленом. Для поиска таких функциональных или структурных зависимостей между двумя или более переменными по накопленным экспериментальным данным весьма полезны методы регрессионного и корреляционного анализа [6]. Регрессионный анализ дает возможность построить, исходя из имеющейся совокупности экспериментальных данных, уравнение, вид которого задает исследователь, а корреляционный анализ позволяет судить о том, насколько хорошо экспериментальные данные согласуются с выбранным уравнением ("ложатся" на соответствующую кривую).

Экспериментальный метод заключается в проведении на действующем объекте эксперимента (подаче экспериментального сигнала  $x^3$  и записи реакции на него выходных координат  $y^3$ ) и аппроксимации опытных данных  $x^3, y^3$  некоторой формальной математической зависимостью  $F$ . Структура  $F$  не зависит явно от свойств перерабатываемых в объекте веществ и характеристик физико-химических процессов и выбирается из условий удобства определения вектора  $a$  и применения ММ (обычно задается линейная по  $a$  структура  $F$ ).

В зависимости от способа задания  $x^3$  различают активные и пассивные экспериментальные методы. В активных методах экспериментатор сам создает испытательный сигнал  $x^3$  желаемой формы, в пассивных методах используются естественные случайные изменения входных и выходных координат объекта.

Экспериментальный метод построения ММ базируется на трех допущениях: 1) объект есть система с сосредоточенными координатами; 2) статические и динамические свойства объекта неизменны во времени, т.е. ММ стационарны; 3) уравнения статики и динамики линеаризуемы в малом, т.е. при небольших отклонениях  $y$  от установившегося состояния.

Справедливость второго и третьего допущений проверяется экспериментальным путем.

## **2.1 Активный метод исследования статики технологических объектов**

Важным этапом построения модели технологического объекта активным методом является планирование эксперимента [7]. План эксперимента и, в частности вычислительного эксперимента, представляет собой метод получения с помощью эксперимента необходимой информации, стоимость

которой зависит от способа сбора и обработки данных. Чем больше средств вложено экспериментатором в данное исследование, тем меньше их остается на остальные исследования, и поэтому необходимо иметь план, позволяющий извлекать из каждого эксперимента максимально возможное количество информации. Основная цель экспериментального следования состоит в возможно более глубоко изучении поведения исследуемого объекта (системы) при наименьших затратах. Следовательно, мы должны рассматривать вопросы такого стратегического планирования эксперимента, которое позволит получить желаемую информацию при минимальных затратах.

Очевидным преимуществом вычислительного эксперимента перед физическим является легкость воспроизведения условий эксперимента. Если мы проводим сравнение двух альтернатив, то можем сравнивать их при одинаковых условиях (при одинаковой последовательности событий). Это достигается путем использования одной и той же последовательности случайных чисел, в результате чего уменьшается разностная вариация усредненных характеристик альтернатив, что позволяет осуществлять статистически значимое различие этих характеристик при значительно меньших размерах выборки. Если же нам нужно оценить абсолютные характеристики системы, мы можем на каждом шаге использовать новую последовательность случайных чисел.

Обсудим процесс построения плана эксперимента, разбив его на три этапа: построение структурной модели, функциональной модели и экспериментальной модели. Вид экспериментальной модели определяется подобранными критериями планирования, к которым относятся: 1) число варьируемых факторов; 2) число уровней (значений) квантования каждого фактора; 3) необходимое число измерений переменной отклика.

Структурная модель характеризуется числом факторов и числом уровней для каждого фактора. Выбор этих параметров определяется целями эксперимента, точностью измерения факторов, интересом к нелинейным эффектам и т.п. Структурная модель эксперимента имеет вид:

$$N_s = (q_1)(q_2)(q_3)...(q_k),$$

где  $N_s$  – число элементарных экспериментов;  $k$  – число факторов эксперимента,  $q_i$  – число уровней  $i$ -го фактора,  $i = 1, 2, 3, \dots, k$ .

Под элементарным экспериментом мы понимаем эксперимент в случае одного фактора и одного уровня.

После определения переменных отклика и выделения существенных факторов необходимо классифицировать эти факторы в соответствии с тем, как они войдут в будущий эксперимент. Исследователю необходимо знать, какие переменные ему понадобится измерять и контролировать в процессе проектирования и проведения эксперимента.

Следующий шаг состоит в определении уровней, на которых следует измерять и устанавливать данный фактор. Минимальное число уровней фактора, не являющегося постоянным, равно двум. Для количественного фактора необходимо выделить интересующую нас область его изменения и определить степень нашей заинтересованности нелинейными эффектами. Если нас интересуют только линейные эффекты, достаточно выбрать два уровня количественной переменной на концах интервала области ее изменения. Если же исследователь предполагает изучать квадратичные эффекты, он должен использовать три уровня. Соответственно для кубического случая необходимы четыре уровня и т.д. Число уровней равно минимальному числу необходимых для восстановления функций точек. Анализ данных существенно упрощается, если сделать уровни равноотстоящими друг от друга. Такое расположение позволяет рассматривать *ортогональное разбиение* и тем самым упрощает определение коэффициентов экспериментальной модели (обычно полиномиальной функции). Поэтому обычно две крайние точки интересующей нас области изменения количественной переменной выбирают как два ее уровня, а остальные уровни располагают так, чтобы они делили полученный отрезок на равные части. Если принять число уровней всех факторов одинаковым, то получим симметричную структурную модель вида  $N_s = q^k$ .

Функциональная модель определяет количество элементов структурной модели, которые должны служить действительными измерителями отклика, т.е. определять, сколько необходимо иметь различных информационных точек. Функциональная модель называется совершенной, если в измерении отклика участвуют все ее элементы, т.е.  $N_f = N_s$ , и несовершенной, если  $N_f < N_s$ . Так как структурная мо-

дель определяет то, что мы хотели бы иметь, то идеальным был бы случай, когда функциональная модель совпадает со структурной. Однако, большинство модельных исследований имеет ограничения, наложенные на время, денежные средства и производительность вычислительных систем. Эти ограничения устанавливают довольно жесткие границы для возможностей экспериментального исследования и не позволяют применять классические статистические процедуры. Функциональная модель призвана помочь нам выбрать приемлемый компромисс между нашими желаниями и ресурсами.

Наиболее прост в планировании однофакторный эксперимент, в котором изменятся лишь единственный фактор. Уровни исследуемого фактора могут быть количественными или качественными, фиксированными или случайными. Число наблюдений или прогонов модели для каждого уровня режима или фактора определяется допустимыми затратами, желаемой мощностью проверки или статистической значимостью результатов.

*Факторным экспериментом* называется такой эксперимент, в котором все уровни данного фактора комбинируются со всеми уровнями всех других факторов [7]. Под симметричностью понимается одинаковое количество уровней для всех факторов. Полный факторный анализ может потребовать слишком много машинного времени, и поэтому необходимо располагать методами отбора переменных, оказывающих решающее влияние на отклик системы. Оказывается, если нас не интересуют взаимодействия факторов высокого порядка, то мы можем получить большое количество информации с помощью исследования лишь некоторой части ( $1/2$ ,  $1/4$ ,  $1/8$  и т.д.) всех возможных комбинаций. В этом случае план эксперимента называется *неполным факторным планом*. Этот метод позволяет исследователю построить серию коротких экспериментов для выявления среди громадного числа переменных небольшого количества наиболее существенных, а затем сконцентрировать на них все свое внимание и провести полный факторный эксперимент.

В дополнение к рассмотренным стратегическим проблемам планирования эксперимента необходимо остановиться и на другой группе проблем, которые можно назвать тактическими. Так как флуктуации присущи всем стохастическим имитационным моделям, то для достижения заданной точности результатов эксперимента необходимо повторять эксперимент (каждый раз меняя значения входящих в модель случайных или неопределенных факторов). Время одного машинного прогона вычислительного эксперимента может быть достаточно большим, и поэтому необходимо стремиться к получению максимальной информации с помощью небольшого числа прогонов. Кроме того, исследователь должен проводить эксперимент таким образом, чтобы не только получить результаты, но и оценить их точность, т.е. степень доверия к тем выводам, которые будут сделаны на основе этих результатов.

При моделировании стохастических систем мы представляем одну или более переменную вероятностными распределениями, в соответствии с которыми распределены их выборочные значения. Исследователь не добивается значительного прогресса в планировании эксперимента до тех пор, пока он не сталкивается с проблемой определения необходимого объема выборки. Размер выборки может определяться по одному из двух путей: 1) априорно, т.е. независимо от работы модели; 2) в процессе работы модели и на основе полученных с помощью модели результатов. Пусть мы хотим построить такую оценку  $\bar{X}$  истинного среднего значения  $\mu$  совокупности, что  $P\{\mu - d \leq \bar{X} \leq \mu + d\} = 1 - \alpha$ , где  $\bar{X}$  – выборочное среднее,  $(1 - \alpha)$  – вероятность того, что интервал  $\mu \pm d$  содержит  $\bar{X}$ . Задача состоит в определении необходимого для выполнения условия  $P\{\mu - d \leq \bar{X} \leq \mu + d\} = 1 - \alpha$  объема выборки. В работе [8] доказано, что в предположении нормальности распределения выборочных значений из нашей генеральной совокупности можно показать, что  $n = (\sigma Z_{\alpha/2})^2 / d^2$ , где  $n$  – объем выборки;  $\sigma$  – среднее квадратическое отклонение;  $Z_{\alpha/2}$  – двусторонняя стандартная нормальная статистика.

Предположим, что мы хотим оценить среднесуточный выход продукции химического завода так, чтобы с вероятностью 0,95 ошибка оценивания составляла не более  $\pm 4$  т. Это означает, что наша оценка  $\bar{X}$  должна лежать внутри интервала  $\mu \pm 4$  т с вероятностью 0,95. Пусть дополнительно известно, что разумный допустимый размах колебаний выхода составляет 80 т. Тогда  $4\sigma = 80$ , или  $\sigma = 20$ ,  $d = 4$ ,  $Z_{\alpha/2} = 1,96$ . Следовательно,  $n = (\sigma Z_{\alpha/2})^2 / d^2 = 96$ .

Предположим, что мы не знаем максимального размаха выхода и не знаем истинного значения  $\sigma$ . В этом случае необходимо задать  $d$  в виде некоторой доли от  $\sigma$ , например,  $d = \sigma/4$ ,  $Z_{\alpha/2} = 1,96$  и получим  $n = (\sigma Z_{\alpha/2})^2 / (d)^2 = 61$ .

Если возможно определить оценку дисперсии  $\sigma^2$  экспериментально и получить  $s^2$ , то размер выборки  $n$  определится выражением  $n = t^2 s^2 / d^2$ , где  $t$  – табулированная величина для заданного доверительного интервала и числа степеней свободы начальной выборки.

Для определения объема выборки можно воспользоваться неравенством Чебышева, которое имеет вид

$$P\{|x - \mu| > k\sigma\} \leq 1/k^2,$$

где  $k$  – заданное число (не меньшее единицы).

Неравенство Чебышева говорит, что при заданном числе  $k$  и произвольной выборке  $x_1, x_2, \dots, x_n$  размера  $n$  по меньшей мере  $1 - 1/k^2$  измерений находятся вблизи среднего значения на расстоянии не более  $k$  среднеквадратических отклонений. Это неравенство справедливо для любых распределений совокупностей.

Пусть мы хотим, чтобы наша оценка попала в интервал  $\mu \pm \sigma/4$  с вероятностью 0,95, т.е.  $P\left\{|\bar{X} - \mu| > \frac{\sigma}{4}\right\} \leq 0,05$ .

Используя неравенство Чебышева, получим

$$P\left\{|\bar{X} - \mu| > \sigma\sqrt{n}/(4n)\right\} \leq 0,05 = 4^2/n,$$

так как  $k = \sqrt{n}/4$ ,  $1/k^2 = 4^2/n$ . Отсюда  $n = 4^2/0,05 = 320$ . Полученный размер выборки существенно больше того, который оказывается достаточным в случае нормального распределения совокупности. Однако он позволяет получить гарантированную точность при отклонениях распределения совокупности от нормального.

### 2.1.1 Построение математической модели статистики технологических объектов

При исследовании статистики технологических объектов наиболее часто встречаются объекты со следующими типами структурных схем (рис. 2.1):  $O_1$  – с одной входной  $x$  и одной выходной  $y$  переменными;  $O_2$  – с двумя входными  $x_1$  и  $x_2$  и выходной  $y$  переменными;  $O_m$  – с  $m$  линейно независимыми входными  $x_1, x_2, \dots, x_m$  и выходной  $y$  переменными. Во многих случаях при проведении эксперимента переменная  $y$  измеряется с некоторой погрешностью  $\tilde{y} = y + z$ , где  $z$  – случайный стационарный процесс с нулевым средним и дисперсией  $\sigma_z^2$ . Структурные схемы для таких случаев будем обозначать  $O^z$ .

Математические модели статистики объекта со структурными схемами  $O_1, O_2, O_m$  и  $O_1^z$  имеют вид:

$$y = f_1(x); y = f_2(x_1, x_2); y = f_m(x_1, x_2, \dots, x_m); M\{\tilde{y} | x\} = f(x),$$

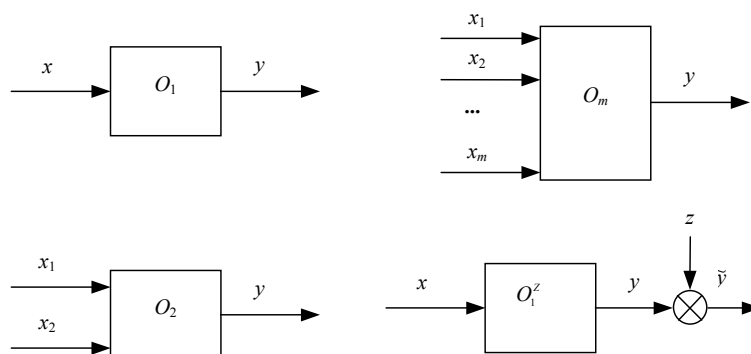
где  $M\{\bullet\}$  – математическое ожидание случайной величины  $\{\bullet\}$

*Построение модели статистики объекта  $O_1$ .*

а) Подготовка и планирование эксперимента.

На этом этапе изучается объект, составляется его структурная схема, экспериментальная установка оборудуется приборами для контроля (регистрации) переменных  $x$  и  $y$ . Определяется диапазон  $[x, \bar{x}]$  возможных изменений входной переменной  $x$ , оценивается время  $T_0 = t_2 - t_1$  окончания переход-

ного процесса  $y(t)$ , вызванного ступенчатым возмущением  $x(t)$  в момент времени  $t_1$ . Здесь  $t_2$  – момент времени, когда  $y(t)$  становится приблизительно равной нулю.



**Рис. 2.1 Структурные схемы технологических объектов**

Планирование эксперимента сводится к выбору числа опытов  $d = \frac{\bar{x} - \underline{x}}{\Delta x}$ ,  $\Delta x = \text{const}$ , (обычно  $d \geq 5 \div 10$ ) и оценке времени эксперимента  $T_s \geq d \Delta t$ , где  $\Delta t \geq (1 \div 1,5) T_0$ .

**б) Проведение эксперимента.**

Экспериментатор устанавливает  $x(t_1) = \underline{x} = x(1)$  и спустя время  $\Delta t$  регистрирует значение выходной переменной  $y(1)$ . Затем устанавливается значение входной переменной  $x(2) = x(1) + \Delta x$ , измеряется  $y(2)$  и т.д. В конце эксперимента получаем таблицу  $x(j), y(j), j = 1, 2, \dots, d$ .

**в) Обработка результатов эксперимента.**

На этом этапе производится статистическая обработка опытных данных и собственно построение математической модели статистики технологического объекта (статической характеристики). Статическая характеристика объекта  $y = f(x)$  используется для оптимизации объекта и расчёта линейных систем автоматического регулирования.

Иногда из каких-то дополнительных соображений известно, что приближающую функцию целесообразно искать в виде

$$y \approx f(x, a_1, a_2, \dots, a_n).$$

Если параметры  $a_1, a_2, \dots, a_n$  определяются из условия совпадения  $y(j)$  и приближающей функции  $f(x_j)$  в точках  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , так называемых узлах интерполяции:

$$y(j) = f(x_j, a_1, a_2, \dots, a_n); \quad j = 1, \dots, n,$$

то такой способ приближения называют интерполяцией или интерполированием.

Пусть  $\underline{x}$  – наименьшее из чисел  $x_i$  – узлов интерполяции, а  $\bar{x}$  – наибольшее из них. Если точка  $x$ , в которой вычисляется значение  $f(x)$ , лежит вне отрезка  $[\underline{x}, \bar{x}]$ , то наряду с термином интерполяция употребляют термин экстраполяция.

Наиболее часто используется интерполяция многочленами. Однако это не единственный возможный вид интерполяции. Иногда удобнее приближать опытные данные тригонометрическими функциями, в других задачах целесообразно приближать многочленом не  $f(x)$ , а  $\ln [f(x)]$ , или приближать  $f(x)$  не многочленом от  $x$ , а многочленом от  $\ln [x]$  [9, 10].

Интерполирование многочленами Лагранжа или Ньютона [9, 10] на всем отрезке  $[a, b]$  с использованием большого числа узлов интерполяции часто приводит к плохому приближению, что объясняется накоплением погрешностей в процессе вычислений. Для того, чтобы избежать больших погрешностей в процессе вычислений весь отрезок  $[\underline{x}, \bar{x}]$  разбивают на частичные отрезки и на каждом из частичных отрезков приближенно заменяют функцию  $f(x)$  многочленом невысокой степени (так называемая кусочно-полиномиальная интерполяция).



Одним из таких способов интерполирования на всем отрезке  $[x, \bar{x}]$  является интерполирование с помощью сплайн-функций (сплайнов). Пусть на  $[x, \bar{x}]$  задана непрерывная функция  $f(x)$ . Введем сетку  $\underline{x} = x_0 < x_1 < \dots < x_{n-1} < x_n = \bar{x}$  и обозначим  $y(j) = f(x_j); j = \overline{0, n}$ .

Сплайном, соответствующим функции  $f(x)$  и данным узлам  $\{x_j\}_{j=0}^n$ , называется функция  $S_p(x)$ , удовлетворяющая следующим условиям:

- а) на каждом сегменте  $[x_{j-1}, x_j], j = 1, 2, \dots, n$ , функция  $S_p(x)$  является многочленом третьей степени;
- б) функция  $S_p(x)$ , а также ее первая и вторая производные непрерывны на  $[x, \bar{x}]$ ;
- в)  $S_p(x_j) = f(x_j) = y(j), j = \overline{0, n}$ .

Сплайн, определяемый условиями а) – в) называется также интерполяционным кубическим сплайном.

На каждом из отрезков  $[x_{j-1}, x_j], j = 2, 3, \dots, n$ , будем искать функцию  $S_p(x) = S_{pj}(x)$  в виде многочлена третьей степени

$$S_{pj}(x) = a_j + b_j(x - x_j) + \frac{c_j}{2}(x - x_j)^2 + \frac{d_j}{6}(x - x_j)^3, \quad x_{j-1} \leq x \leq x_j, \quad j = \overline{1, n},$$

где  $a_j, b_j, c_j, d_j$  – коэффициенты, подлежащие определению.

Вычислим производные сплайна  $S_{pj}(x)$ :

$$S'_{pj}(x) = b_j + c_j(x - x_j) + \frac{d_j}{2}(x - x_j)^2; \quad S''_{pj}(x) = c_j + d_j(x - x_j); \quad S'''_{pj}(x) = d_j.$$

Следовательно, имеем:

$$a_j = S_{pj}(x_j); \quad b_j = S'_{pj}(x_j); \quad c_j = S''_{pj}(x_j); \quad d_j = S'''_{pj}(x_j).$$

Из условий интерполирования  $S_p(x_j) = f(x_j), j = \overline{0, n}$  получаем, что  $a_j = f(x_j), j = \overline{0, n}$ . Далее требование непрерывности функции  $S_p(x)$  приводит к условиям  $S_{pj-1}(x_{j-1}) = S_{pj}(x_{j-1}), j = 2, 3, \dots, n$ .

Из условия непрерывности сплайна на всем отрезке  $[x, \bar{x}]$  интерполирования, получаем при  $j = 1, \dots, n$  уравнения

$$a_{j-1} = a_j + b_j(x_{j-1} - x_j) + \frac{c_j}{2}(x_{j-1} - x_j)^2 + \frac{d_j}{6}(x_{j-1} - x_j)^3.$$

Перепишем эти уравнения с учетом обозначения  $h_j = x_j - x_{j-1}$ :

$$h_j b_j - \frac{h_j^2}{2} c_j + \frac{h_j^3}{6} d_j = f(x_j) - f(x_{j-1}) = y(j) - y(j-1). \quad (2.1)$$

Условия непрерывности первой производной сплайна  $S_p(x)$ :

$$S'_{pj-1}(x_j) = S'_{pj}(x_j); \quad j = 2, 3, \dots, n$$

приводят к уравнениям

$$c_j h_j - \frac{d_j}{2} h_j^2 = b_j - b_{j-1}; \quad j = 2, 3, \dots, n. \quad (2.2)$$

Из условия непрерывности второй производной получаем уравнения

$$d_j h_j = c_j - c_{j-1}; \quad j = 2, 3, \dots, n. \quad (2.3)$$

Объединяя (2.1) – (2.3), получаем систему  $3n - 2$  уравнений относительно  $3n$  неизвестных  $b_j, c_j, d_j, j = 1, 2, \dots, n$ . Два недостающих уравнения получают, задавая граничные условия для  $S_p(x)$ . Предположим, что функция  $f(x)$  удовлетворяет условиям  $f''(\underline{x}) = f''(\bar{x}) = 0$ . Отсюда получаем  $S''_{p1}(x_1) = 0, S''_{pn}(x_n) = 0$ , т.е.  $c_1 - d_1 h_1 = 0, c_n = 0$ .

Таким образом, приходим после некоторых преобразований к замкнутой системе для определения коэффициентов кубического сплайна:

$$h_j c_{j-1} + 2(h_j + h_{j+1})c_j + h_{j+1}c_{j+1} = 6 \left( \frac{y(j+1) - y(j)}{h_{j+1}} + \frac{y(j) - y(j-1)}{h_j} \right); \quad (2.4)$$

$$j = 1, 2, \dots, n-1, \quad c_0 = c_n = 0.$$

В силу диагонального преобладания система (2.4) имеет единственное решение. Так как матрица системы трехдиагональная, решение легко найти методом прогонки. По найденным коэффициентам  $c_j$  определяются коэффициенты  $b_j, d_j$  с помощью явных формул:

$$d_j = \frac{c_j - c_{j-1}}{h_j}, \quad b_j = \frac{h_j}{2} c_j - \frac{h_j^2}{6} d_j + \frac{y(j) - y(j-1)}{h_j}, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Заметим, что можно рассматривать и другие граничные условия.

*Наилучшее приближение функции, заданной таблично (аппроксимация).*

Пусть значения табличной функции  $f(x_j) = y(j)$  и приближающих функций  $\varphi_i(x), i = 0, 1, \dots, m$  известны в точках  $x_j \in [\underline{x}, \bar{x}], j = 0, 1, \dots, n$ . Если  $n > m$ , то задача интерполирования становится переопределенной. В этом случае имеем задачу о наилучшем приближении. Введем обобщенный многочлен

$$\varphi(x) = c_0 \varphi_0(x) + c_1 \varphi_1(x) + \dots + c_m \varphi_m(x)$$

и будем рассматривать его значения в узлах  $x_j$ , т.е.

$$\varphi(x_j) = c_0 \varphi_0(x_j) + c_1 \varphi_1(x_j) + \dots + c_m \varphi_m(x_j), \quad j = 0, 1, \dots, n.$$

Образует разности  $r_j = \varphi(x_j) - y(j), j = 0, 1, \dots, n$ , характеризующие отклонение в узлах  $x_j$  экспериментальных данных  $y(j)$  от расчетного значения, полученного с помощью обобщенного многочлена  $\varphi(x_j)$ . Для вектора погрешностей  $r = (r_0, r_1, \dots, r_n)^T$  можно ввести ту или иную норму, например:

$$\|r\|_E = \left( \sum_{j=0}^n r_j^2 \right)^{1/2} = \left( \sum_{j=0}^n (\varphi(x_j) - y(j))^2 \right)^{1/2}$$

или

$$\|r\|_C = \max_{0 \leq j \leq n} |r_j| = \max_{0 \leq j \leq n} |\varphi(x_j) - y(j)|.$$

Задача о наилучшем приближении экспериментальных данных  $y(j)$  состоит в нахождении коэффициентов  $c_0, c_1, \dots, c_m$ , минимизирующих норму вектора  $r$ . В зависимости от выбора нормы получим различные задачи. Так норме  $\|r\|_E$  соответствует задача о наилучшем среднеквадратичном приближении, а норме  $\|r\|_C$  – задача о наилучшем равномерном приближении экспериментальных данных.

**Пример.** Построим наилучшее среднеквадратичное приближение для случая  $m = 1$ ,  $n = 2$ , когда заданы  $f(x_j) = y(j)$ ,  $j = 0, 1, 2$ . Обозначим  $h_0 = x_1 - x_0$ ,  $h_1 = x_2 - x_1$  и будем искать обобщенный многочлен  $\varphi(x)$  в виде  $\varphi(x) = c_0 + c_1(x - x_1)$ .

Тогда для  $r(x) = \varphi(x) - f(x)$  получим, что  $\|r\|^2 = \Phi(c_0, c_1)$ ,

где  $\Phi(c_0, c_1) = (c_0 - c_1 h_0 - y(0))^2 + (c_0 - y(1))^2 + (c_0 + c_1 h_1 - y(2))^2$ .

Коэффициенты  $c_0$ ,  $c_1$  определяются из условия

$$\min_{c_0, c_1} \Phi(c_0, c_1). \quad (2.5)$$

Метод определения коэффициентов обобщенного многочлена из условия (2.5) называют **методом наименьших квадратов**.

Точку минимума  $\Phi(c_0, c_1)$  найдем из условия (в данном случае необходимого и достаточного)

$$\Phi'_{c_0} = \Phi'_{c_1} = 0, \text{ т.е. } \frac{\partial \Phi}{\partial c_0} = 0; \frac{\partial \Phi}{\partial c_1} = 0,$$

которое приводит к системе линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} 3c_0 + (h_1 - h_0)c_1 &= y(0) + y(1) + y(2), \\ (h_1 - h_0)c_0 + (h_0^2 + h_1^2)c_1 &= h_1 y(2) - h_0 y(0). \end{aligned}$$

Отсюда получим:

$$\begin{aligned} c_0 &= \alpha_0 y(0) + (1 - \alpha_0 - \alpha_2) y(1) + \alpha_2 y(2), \\ c_1 &= \beta \frac{y(2) - y(1)}{h_1} + (1 - \beta) \frac{y(1) - y(0)}{h_0}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

где

$$\alpha_0 = \frac{h_1(h_0 + h_1)}{2(h_0^2 + h_1^2 + h_1 h_0)},$$

$$\alpha_2 = \frac{h_0(h_0 + h_1)}{2(h_0^2 + h_1^2 + h_1 h_0)}, \quad \beta = \frac{h_1(2h_1 + h_0)}{2(h_0^2 + h_1^2 + h_1 h_0)}.$$

Если  $h_0 = h_1 = h$ , то

$$c_0 = \frac{1}{3}(y(0) + y(1) + y(2)), \quad c_1 = \frac{y(2) - y(0)}{2h}. \quad (2.7)$$

Погрешность полученного приближения на равномерной сетке имеет второй порядок по  $h$ , т.е.

$$\|y - \varphi\| = \frac{h^2}{\sqrt{6}} |f''(\xi)|, \text{ где } \xi \in (x_0, x_2).$$

*Сглаживание сеточных функций методом "скользящего среднего".*

Пусть имеется таблица значений  $f(x_j) = y(j)$ ,  $j = \overline{0, n}$ , полученных путем измерения некоторой физической величины или с помощью численных расчетов. Может оказаться, что  $f(x)$  сильно меняется на отдельных участках. В этом случае иногда целесообразно применить процедуру сглаживания, т.е. приближенно заменить  $f(x)$  другой, более гладкой функцией  $\varphi(x)$ .

Для построения сглаженных функций можно воспользоваться среднеквадратичными приближениями. Согласно (2.7) получаем, что многочлен  $\varphi^{(j)}(x)$  наилучшего среднеквадратичного приближения, построенный по значениям  $y(j-1)$ ,  $y(j)$ ,  $y(j+1)$ , имеет вид:

$$\varphi^{(j)}(x) = \frac{y(j-1) + y(j) + y(j+1)}{3} + \frac{y(j+1) - y(j-1)}{2h}(x - x_j),$$

причем

$$\varphi^{(j)}(x_j) = \frac{y^{(j-1)} + y^{(j)} + y^{(j+1)}}{3}, \quad j = 1, 2, \dots, n-1. \quad (2.8)$$

Доопределим  $\varphi^{(0)}(x_0) = y(0)$ ,  $\varphi^{(n)}(x_n) = y(n)$  и обозначим  $\varphi_j = \varphi^{(j)}(x_j)$ ,  $j = 0, 1, \dots, n$ .

Процедура сглаживания по формулам (2.8) состоит в замене сеточной функции  $\{f(x_j)\}_{j=0}^n$  другой более гладкой сеточной функцией  $\{\varphi_j\}_{j=0}^n$ , определенной согласно (2.8).

В приведенном примере на рис. 2.2 функция  $f(x_j)$  имеет две особенности: разрыв при  $j = 3$  и выброс при  $j = 8$ . Сглаживание приводит к размыванию разрыва и выброса.

В рассмотренном случае сглаживание свелось к осреднению функции  $f(x)$  по трем соседним точкам. Можно проводить осреднение по большему числу точек, например, по пяти точкам.

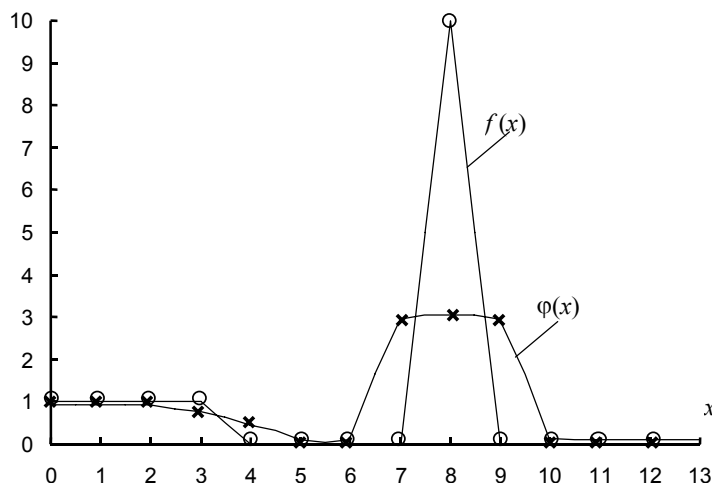


Рис. 2.2 Пример сглаживания сеточной функции

$\{f(x_j)\}_{j=0}^{12}$ ,  $\{\varphi(x_j)\}_{j=0}^{12}$  — сглаженная функция

### Сглаживание методом четвертых разностей.

Пусть известны  $x(j)$ ,  $y_{cp}(j)$ ,  $j = \overline{1, n}$ . Аппроксимируем первые пять ординат  $y_{cp}(1) \div y_{cp}(5)$  параболой  $y = a_0 + a_1x + a_2x^2$ , коэффициенты  $a_0, a_2, a_1$  определим методом наименьших квадратов. Далее вычислим величину "невязки"  $\delta y(3)$  средней ординаты  $y_{cp}(3)$  и параболы  $y(x_3)$ . Оказывается, что  $\delta y(3) \approx \frac{1}{12} \Delta^4 y_{cp}(3)$ , где  $\Delta^4 y_{cp}(3)$  — четвертая центральная разность  $y_{cp}(3)$  в точке  $x(3)$ . Следовательно, величину  $y(x_3)$  сглаженной функции можно найти по формуле

$$y(x_3) \approx y_{cp}(3) - \frac{1}{12} \Delta^4 y_{cp}(3).$$

Затем применим рассмотренную процедуру к ординатам  $y_{cp}(2) \dots y_{cp}(6)$  и находим  $y(x_4) \approx y_{cp}(4) - \frac{1}{12} \Delta^4 y_{cp}(4)$ , и т.д. В общем случае имеем:

$$y(j) \approx y_{cp}(j) - \frac{1}{12} \Delta^4 y_{cp}(j), \quad j = 3, 4, \dots, n-2, \quad (2.9)$$

где четвертая центральная разность  $\Delta^4 y_{cp}(j)$  вычисляется по формуле

$$\Delta^4 y_{cp}(j) = y_{cp}(j-2) - 4y_{cp}(j-1) + 6y_{cp}(j) - 4y_{cp}(j+1) + y_{cp}(j+1).$$

Значения  $y_{cp}(1)$ ,  $y_{cp}(2)$ ,  $y_{cp}(n-1)$ ,  $y_{cp}(n)$  не могут быть сглажены по формуле (2.9) и для их обработки следует применять другие зависимости.

*Метод наименьших квадратов и регуляризация.*

Решение многомерных задач часто сводится к решению следующих задач. В некоторой области  $s$ -мерного пространства  $X$  заданы точки  $x_1, x_2, \dots, x_n$  и значения функции  $f$  в этих точках, т.е.  $f(x_j) = y(j)$ . Требуется получить приближение к значению функции  $f(x)$ . Рассмотрим метод наименьших квадратов.

Пусть приближающая функция ищется в виде

$$g(x) = \sum_{i=1}^m c_i \varphi_i(x), \quad (2.10)$$

где  $m < n$ .

Коэффициенты  $c_i$  будем определять из условия

$$\min_{c_1, c_2, \dots, c_m} \Phi(c_1, c_2, \dots, c_m),$$

$$\text{где } \Phi(g) = \Phi(c) = \sum_{j=1}^n P_j (g(x_j) - y(j))^2 = \sum_{j=1}^n P_j \left( \sum_{i=1}^m c_i \varphi_i(x_j) - y(j) \right)^2.$$

В основе метода наименьших квадратов лежит следующее соображение. Малость величины  $\Phi(c)$  обеспечивает близость функций  $g(x)$  и  $f(x)$  в точках  $x_j$ . При  $m \ll n$  функция  $g(x)$  содержит относительно мало параметров и поэтому у нее меньше возможностей отличаться от  $f(x)$  вне узлов по сравнению со случаем  $m = n$ .

Числа  $P_j > 0$ , называемые весами, подбирают в зависимости от плотности распределения точек  $x_j$ . Если значения  $f(x_j) = y(j)$  содержат случайную ошибку, то их выбирают также в зависимости от дисперсии ошибок измеряемых значений. Там, где точки  $x_j$  распределены плотнее, числа  $P_j$  берутся меньше; значениям  $f(x_j) = y(j)$  с большей дисперсией ошибки ставят в соответствие также меньшие значения  $P_j$ . Для конкретных задач принципы выбора  $P_j$  и  $m$  вырабатываются с учетом специфических свойств задач на основе статистических критериев и численного эксперимента.

Используя необходимое (и для данного случая достаточное) условие минимума функции  $\Phi(c)$ , получим систему линейных алгебраических уравнений для определения  $c_i$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial c_k} &= \sum_{i=1}^m d_{ki} c_i - d_k = 0, k = \overline{1, m}, \\ d_{ki} &= d_{ik} = \sum_{j=1}^n P_j \varphi_k(x_j) \varphi_i(x_j), \\ d_k &= \sum_{j=1}^n P_j \varphi_k(x_j) y(j). \end{aligned} \quad (2.11)$$

Числа  $c_i$  можно находить непосредственно решая указанную систему уравнений (2.11) или минимизируя каким-либо методом функцию  $\Phi(c)$ .

В основе метода регуляризации непосредственно лежат соображения о сглаживании аппроксимирующей функции. Наиболее распространенной формой метода регуляризации является следующая. Приближение отыскивается в виде (2.10), а коэффициенты  $c_i$  выбираются из условия минимума выражения:

$$\Phi(\alpha, g) = \Phi(g) + \alpha\psi(g), \alpha > 0. \quad (2.12)$$

Функционал  $\psi(g)$  подбирается из следующего условия: если значение этого функционала невелико, то функция  $\varphi$  обладает определенной гладкостью. Например,  $\psi(\varphi)$  может быть некоторым приближением к интегралу  $\int_x |\text{grad}(g(x))|^2 dx$ . Распространен случай  $m = n$ . Пусть минимум  $\Phi(\alpha, g)$ , достигается при некоторых  $c_1^\alpha, c_2^\alpha, \dots, c_n^\alpha$  и

$$g^\alpha(x) = \sum_{i=1}^n c_i^\alpha \varphi_i(x).$$

Рассмотрим крайние случаи  $\alpha = 0$  и  $\alpha \rightarrow \infty$ . Имеем равенство

$$\Phi(0, g) = \sum_{j=1}^n P_j \left( \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i(x_j) - y(j) \right)^2. \quad (2.13)$$

Если  $\det \|\varphi_i(x_j)\| \neq 0$ , система  $\sum_{i=1}^n c_i \varphi_i(x_j) = y(j)$ ,  $j = 1, 2, \dots, n$  имеет решение, и на ее решении правая часть равенства (2.13) обращается в нуль. Тогда  $g^0(x)$  совпадает с интерполяционным многочленом с узлами интерполяции  $x_j$ . При больших  $\alpha$  в функционале (2.11) определяющим является второе слагаемое, нижняя грань которого достигается на гладкой функции. Следовательно, есть все основания утверждать, что при промежуточных значениях  $\alpha$  функции  $g^\alpha(x)$  будут гладкими и в то же время не очень сильно отличающимися от приближаемой функции в заданных узлах.

### ***Приближение функций с помощью нейронных сетей.***

В последние годы появился новый алгоритмический аппарат приближения функций многих переменных с помощью линейных операций и суперпозиций функций одного переменного. Такое приближение осуществляется специальными формальными устройствами – *нейронными сетями*, состоящими из формальных *нейронов*.

Нейрон получает на входе вектор сигналов  $x = (x_1, x_2, \dots, x_m)$ , вычисляет его скалярное произведение на вектор весов  $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$  и некоторую функцию одного переменного  $\varphi(z)$ , где  $z$  – скалярное произведение  $x$  на  $\alpha$ . Результат рассылается на входы других нейронов или передается на выход. Таким образом, *нейронные сети вычисляют суперпозиции простых функций одного переменного и их линейных комбинаций*.

Для описания алгоритмов и устройств в нейро-информатике выработана специальная схемотехника, в которой элементарные устройства – сумматоры, синапсы, нейроны и т.п. – объединяются в сети, предназначенные для решения задач. Наиболее важные элементы нейросистем – *адаптивный сумматор* и *нелинейный преобразователь*. Адаптивный сумматор вычисляет скалярное произведение входного сигнала  $x$  на вектор параметров  $\alpha$  (рис. 2.3).

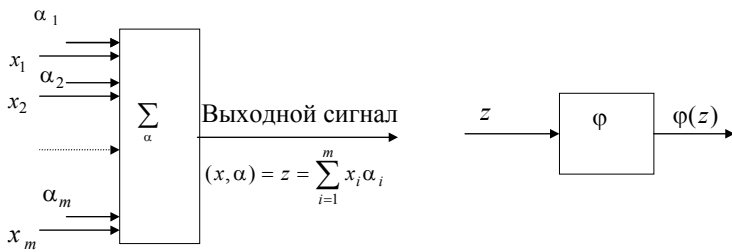


Рис. 2.3 Адаптивный сумматор

Рис. 2.4 Нелинейный преобразователь сигнала

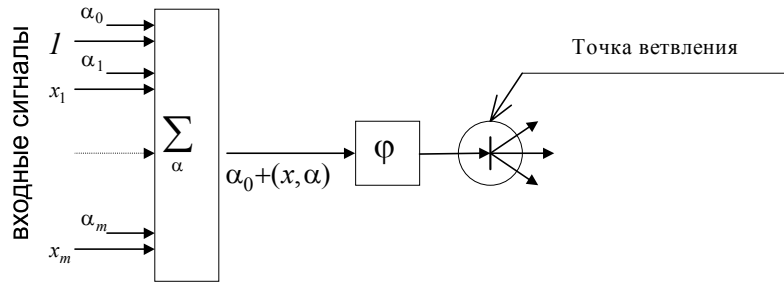


Рис. 2.5 Формальный нейрон

Адаптивным его называют из-за наличия вектора настраиваемых параметров  $\alpha$ . Нелинейный преобразователь получает скалярный входной сигнал  $z$  и переводит его в  $\varphi(z)$  (рис. 2.4).

**Стандартный формальный нейрон** составлен из входного сумматора, нелинейного преобразователя и точки ветвления (рис. 2.5).

Точка ветвления служит для рассылки одного сигнала по нескольким адресам. Она получает скалярный входной сигнал  $z$  и передает его выходам. Среди нейронных сетей можно выделить две базовые архитектуры: *слоистые* и *полносвязные* сети.

**Слоистые сети.** Нейроны расположены в несколько слоев (рис. 2.6). Нейроны первого слоя получают входные сигналы, преобразуют их и через точки ветвления передают нейронам второго слоя. Далее срабатывает второй слой и т.д. до  $k$ -го слоя, который выдает выходные сигналы для пользователя. Если не оговорено противное, то каждый выходной сигнал  $i$ -го слоя подается на вход всех нейронов  $(i + 1)$ -го слоя. Число нейронов в каждом слое может быть любым и никак заранее не связано с количеством нейронов в других слоях. Стандартный способ подачи входных сигналов: все нейроны первого слоя получают каждый входной сигнал. Особое распространение получили трехслойные сети, в которых каждый слой имеет свое наименование: первый – входной, второй – скрытый, третий – выходной.

**Полносвязные сети.** Каждый нейрон передает свой выходной сигнал остальным нейронам, включая самого себя. Выходными сигналами сети могут быть все или некоторые выходные сигналы нейронов после нескольких тактов функционирования сети. Все выходные сигналы подаются всем нейронам.

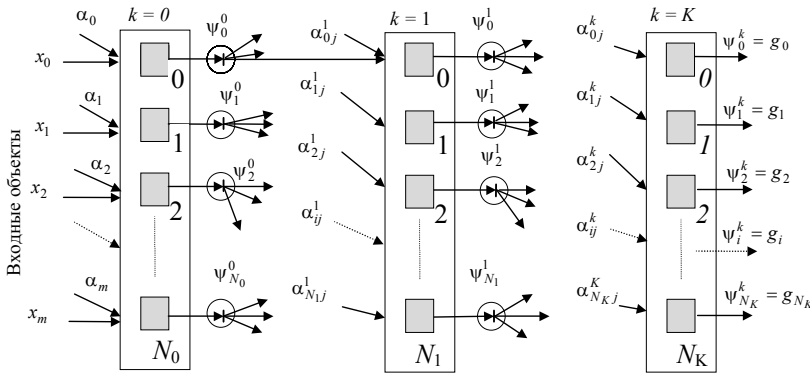
Таким образом, нейронные сети вычисляют линейные функции, нелинейные функции одного переменного, а также все возможные суперпозиции – функции от функций, получаемые при каскадном соединении сетей.

Рассмотрим более подробно слоистую сеть (рис. 2.6). Ее структура характеризуется числом  $K$  и количеством нейронов  $m$  в каждом слое. Заметим, что в слоистой сети связи между нейронами в слое отсутствуют.

Введем новые обозначения: вход  $i$ -го нейрона  $k$ -го слоя –  $z_i^k$ , выход  $i$ -го нейрона –  $\psi_i^k$ , количество нейронов в  $k$ -ом слое –  $N_k$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots, K$ . Тогда суперпозиция входных сигналов  $i$ -го нейрона  $k$ -го слоя имеет вид:

$$z_i^k = \sum_{j=0}^{N_{k-1}} \alpha_{ij}^k \psi_j^{k-1}, \quad i = \overline{1, N_k}, \quad k = \overline{1, K}.$$

Здесь  $\alpha_{ij}^k$  – весовые коэффициенты, являющиеся настраиваемыми параметрами и характеризующими связь  $j$ -го нейрона  $(k - 1)$ -го слоя с  $i$ -ым нейроном  $k$ -го слоя.



**Рис. 2.6 Слоистая сеть**

Для нулевого слоя имеем  $\psi_j^0 = x_j, j = \overline{1, m}$ . С учетом принятых обозначений аппроксимирующая функция  $g_i, i = \overline{1, N_k}$ , представляет собой персептрон и может быть записана в виде

$$\begin{aligned} g_i &= \psi_i^k, \quad i = \overline{1, N_k}, \\ \psi_i^k &= \varphi(z_i^k), \quad i = \overline{1, N_k}, \quad k = \overline{1, K}, \\ \psi_0^k &= 1, \quad k = \overline{0, K-1}. \end{aligned}$$

В качестве функций активации нейронов (нелинейного преобразователя нейронов  $\varphi$ ) часто используют гладкие функции вида:

$$\varphi(z) = z; \quad \varphi(z) = \frac{1}{1 - \exp(-z)}; \quad \varphi(z) = \frac{\exp(z) - \exp(-z)}{\exp(z) + \exp(-z)}.$$

Приближение функций с помощью нейронных сетей сводится к их обучению. При этом входные сигналы  $x$  подаются обучаемой сети на обработку, задаются значения весовых коэффициентов  $\alpha$ , а получаемые выходные сигналы  $g$  сравниваются с экспериментальными данными  $y$ . Затем строится оценка работы сети, например, как критерий максимального правдоподобия

$$E(\alpha) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^P \sum_{i=1}^{N_K} (y_{i\lambda} - g_i(x^{(\lambda)}, \alpha))^2,$$

где  $g_i(x^{(\lambda)}, \alpha)$  –  $i$ -ый выход сети, соответствующий векторам входных сигналов  $x^{(\lambda)}$  и весовых коэффициентов  $\alpha$ ;  $P$  – объем обучающей выборки  $(x^{(\lambda)}, y_\lambda)$ .

Поиск оптимальных значений весовых коэффициентов  $\alpha$ , при которых критерий  $E(\alpha)$  минимален, производится с помощью известных методов решения экстремальных задач.

При обучении нейронных сетей целесообразно использовать метод регуляризации, позволяющий получить сглаженные функции  $g_i(x^{(\lambda)}, \alpha)$ . При этом оценка работы сети выбирается в виде

$$\hat{E}(\beta, \alpha) = E(\alpha) + \beta \Omega(\alpha),$$



где  $\beta$  – параметр регуляризации,  $\Omega(\alpha)$  – равномерно выпуклая функция, например,  $\Omega(\alpha) = \frac{1}{2} \alpha^T \alpha$ .

Оптимальное значение параметра регуляризации  $\beta$  подбирается итерационным методом.

## 2.1.2 Построение математической модели статики объектов $O^Z$

### ПОДГОТОВКА И ПЛАНИРОВАНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА.

На этом этапе изучается объект, выбираются переменные  $x$ ,  $y$  и диапазон изменения  $[x, \bar{x}]$ , определяется время  $T_0$  окончания переходного процесса. Далее оценивается дисперсия случайной величины  $z$ . Для этого устанавливается  $x_j = \text{const}$  и регистрируется  $N$  значений  $\tilde{y}_{ji}, i = \overline{1, N}$ ,  $N \geq 30 - 50$ . Вычисляются среднее арифметическое  $y_{cp}$  и оценка дисперсии  $\sigma_z^2$ :

$$y_{cp}(j) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \tilde{y}_{ji}, \quad \sigma_{zj}^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (\tilde{y}_{ji} - y_{cp}(j))^2.$$

Величина  $\Delta x$  выбираются в процессе проведения эксперимента из условия, чтобы соответствующее изменение  $\Delta \tilde{y} \geq (2 \dots 3) \sigma_z$ . Время проведения одного опыта  $\Delta t$  принимается равным  $T_0 + T_n$ , где время наблюдения  $T_n$  установившегося значения выходной координаты зависит от частотного спектра  $z(t)$  и частоты измерения  $\tilde{y}(t)$  в момент времени  $t_i, i = \overline{1, N_1}, N_1 < N$  на отрезке  $[T_0, T_0 + T_n]$ . Обычно  $T_n \leq (1 \dots 2) T_0$  из-за трудности стабилизации входных переменных объекта.

### ПРОВЕДЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА.

Методика проведения опыта отличается от рассмотренной в п. 2.1.1, что проводится  $N_1$  измерение  $\tilde{y}(t)$  в моменты времени  $t_i$  на отрезках  $[T_0, T_0 + T_n]$ .

Среднее значение  $y_{cp}(j) = \frac{1}{N_1} \sum_{i=1}^{N_1} \tilde{y}_j(t_i)$  соответствует величине  $x(j)$  входной переменной,  $j = 1, 2, \dots, n$ .

### ОБРАБОТКА ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ И ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ.

При малом числе  $N_1$  усредненные значения  $y_{cp}(j)$  будут искажены помехой  $z$ , что затрудняет или делает невозможным построение модели статики и ее анализ. Поэтому часто экспериментальные данные предварительно сглаживают, например, методом скользящего среднего или методом четвертых разностей.

После сглаживания экспериментальных данных для построения моделей применяют вышеизложенные методы интерполяции и аппроксимации сглаженных данных.

Рассмотрим методику построения уравнений моделей статики для объектов  $O^z$ , выходная координата  $\tilde{y}$  которых есть случайная величина.

Пусть задан некоторый объект  $O_i^z$ , входная и выходная переменные  $X$  и  $Y$  которого являются случайными величинами. Естественно ожидать, что значения  $y$  величины  $Y$  определяются значениями  $x$ . Однако в подобных ситуациях следует говорить о наличии стохастической (вероятностной) связи между переменными  $Y$  и  $X$  объекта в статике. На практике при исследовании зависимости  $\varphi(x)$  между переменными  $Y$  и  $X$  обычно ограничиваются изучением зависимости между условным математическим ожиданием  $M(Y |_{X=x})$  и переменной  $x$ , т.е.  $M(Y |_{X=x}) = \varphi(x)$ .

Зависимость  $M(Y |_{X=x})$  от  $x$  называется *регрессионной*. Знание статистической зависимости между случайными переменными имеет большое практическое значение: с ее помощью можно прогнозировать значение зависимой случайной переменной в предположении, что независимая переменная примет вполне определенное значение. Однако, поскольку понятие статистической зависимости относится к

осредненным условиям, прогнозы не могут быть безошибочными. Применяя вероятностные методы, как будет показано далее, можно вычислить вероятность того, что ошибка прогноза не выйдет за определенные границы.

Уравнения регрессии классифицируют на линейные (корреляционные) и нелинейные.

Уравнение линейной регрессии (истинное) запишем в следующем виде

$$M\{Y |_{X=x}\} = \eta = \beta_0 + \beta_1(x - \bar{x}). \quad (2.14)$$

Оценки истинных параметров модели  $\beta_0$  и  $\beta_1$  обозначим через  $b_0$  и  $b_1$ , а оценку  $\eta$  через  $\hat{y}$ . Подставив в (2.14) вместо истинных параметров их оценки, получим уравнение линейной регрессии

$$\hat{y} = b_0 + b_1(x - \bar{x}). \quad (2.15)$$

Оценки  $b_0$  и  $b_1$  уравнения регрессии (2.15) будем находить из условия минимума квадратов отклонений средних значений экспериментальных данных  $y_{cp}(j)$  от вычисленных по уравнению регрессии  $\hat{y}(x_j)$ , т.е. по методу наименьших квадратов (МНК):

$$\Phi(b_0, b_1) = \sum_{j=1}^n P_j (y_{cp}(j) - \hat{y}(x_j))^2 = \sum_{j=1}^n P_j [y_{cp}(j) - b_0 - b_1(x_j - \bar{x})]^2 \rightarrow \min_{b_0, b_1},$$

где  $P_j$  – число повторных измерений  $\tilde{y}(j)$ . Используя необходимые (и для данного случая достаточные) условия минимума функции  $\Phi(b_0, b_1)$ , получим систему нормальных уравнений:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi}{\partial b_0} &= -2 \sum_{j=1}^n P_j [y_{cp}(j) - b_0 - b_1(x_j - \bar{x})] = 0, \\ \frac{\partial \Phi}{\partial b_1} &= -2 \sum_{j=1}^n P_j [y_{cp}(j) - b_0 - b_1(x_j - \bar{x})](x_j - \bar{x}) = 0. \end{aligned}$$

Приводя подобные члены, получим:

$$\begin{aligned} b_0 \sum_{j=1}^n P_j + b_1 \sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x}) &= \sum_{j=1}^n P_j y_{cp}(j), \\ b_0 \sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x}) + b_1 \sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x})^2 &= \sum_{j=1}^n P_j y_{cp}(j)(x_j - \bar{x}), \end{aligned}$$

откуда имеем:

$$b_0 = \frac{\sum_{j=1}^n P_j y_{cp}(j)}{\sum_{j=1}^n P_j} = \bar{y}, \quad b_1 = \frac{\sum_{j=1}^n P_j y_{cp}(j)(x_j - \bar{x})}{\sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x})^2}.$$

Оценки, получаемые по методу наименьших квадратов, обладают минимальной дисперсией в классе линейных оценок, т.е. являются несмещенными –  $M\{b_0\} = \beta_0$ ,  $M\{b_1\} = \beta_1$ . Их дисперсии рассчитываются следующим образом:

$$M\{(b_0 - \beta_0)^2\} \approx S_{b_0}^2 = \frac{\sigma_{y(j)}^2}{\sum_{j=1}^n P_j}; \quad M\{(b_1 - \beta_1)^2\} \approx S_{b_1}^2 = \frac{\sigma_{y(j)}^2}{\sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x})^2}.$$

Найдем несмещенную оценку  $\sigma_{y(j)}^2$ :

$$\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{P_j} (y_{ji} - \eta_j)^2 = \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{P_j} (y_{ji} - y_{cp}(j))^2 + \sum_{j=1}^n P_j (y_{cp}(j) - \hat{y}(x_j))^2 + (b_0 - \beta_0)^2 \sum_{j=1}^n P_j + (b_1 - \beta_1)^2 \sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x})^2. \quad (2.16)$$

Первый член правой части есть мера экспериментальной ошибки, полученной в каждом отдельном опыте, выполненном при различных значениях  $x_j$ , второй член служит мерой эффективности линейной модели для подгонки экспериментальных данных. Левая часть равенства является суммой квадратов с  $\sum_{j=1}^n P_j$  степенями свободы и распределенной как  $\sigma_{y(j)}^2 \chi^2$ . Можно показать, что каждый член правой части равенства распределен по закону  $\sigma_{y(j)}^2 \chi^2$  с  $\sum_{j=1}^n P_j - n$ ,  $n - 2$ , 1 и 1 степенями свободы, соответственно.

Если оценивать  $\sigma_{y(j)}^2$  по второму члену правой части равенства (2.16), то получим несмещенную оценку  $S_r^2$  дисперсии адекватности

$$S_r^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{j=1}^n P_j (y_{cp}(j) - \hat{y}(x_j))^2.$$

Величина  $S_r^2$  характеризует влияние переменной  $x$ .

Величина  $S_l^2$  характеризует влияние неучтенных факторов и служит мерой рассеяния, вызванного экспериментальной ошибкой:

$$S_l^2 = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{P_j} (y_{ji} - y_{cp}(j))^2}{\sum_{j=1}^n P_j - n}.$$

Эта величина тоже является несмещенной оценкой. Очевидно, чем меньше влияние неучтенных факторов, тем лучше математическая модель соответствует экспериментальным данным, так как изменение  $y$  в основном объясняется влиянием переменной  $x$ .

Поэтому, прежде чем принять решение по поводу модели, необходимо проверить гипотезу о том, что линейная модель удовлетворительно описывает экспериментальные данные. Для проверки этой гипотезы вычислим статистику  $F = \frac{S_r^2}{S_l^2}$ , которая имеет распределение Фишера с  $f_1 = (n - 2)$  и  $f_2 = \sum_{j=1}^n P_j - n$  степенями свободы. По доверительной вероятности  $\rho = 1 - \alpha = \{0,9; 0,95; 0,99\}$  и числу степеней свободы  $f_1, f_2$  находят по таблицам  $F$ -распределения критическое значение  $F(\rho, f_1, f_2)$ . Далее проверяется выполнение условия

$$F = S_r^2 / S_l^2 < F(\rho, f_1, f_2).$$

Если это условие выполняется, т. е. вычисленные значения  $F$  меньше табличного значения  $F(\rho, f_1, f_2)$ , то гипотеза о том, что линейная модель адекватна, принимается. В противном случае гипотезу о линейности модели следует отвергнуть и для описания экспериментальных данных необходимо выбрать другую модель.

В случае  $F < F(\rho, f_1, f_2)$  оценки дисперсий  $S_r^2$  и  $S_l^2$  можно объединить, чтобы получить лучшую оценку  $\sigma_{y(j)}^2$  с  $\sum_{j=1}^n P_j - 2$  степенями свободы:

$$S_{y(j)}^2 = \frac{\sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{P_j} (y_{ji} - y_{cp}(j))^2 + \sum_{j=1}^n P_j (y_{cp}(j) - \hat{y}(x_j))^2}{(\sum_{j=1}^n P_j - n) + (n - 2)} =$$

$$= \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^{P_j} \frac{(y_{ji} - \hat{y}(x_j))^2}{\sum_{j=1}^n P_j - 2}$$

Конечно, если повторные измерения  $y_{ji}$  при заданном  $x_j$  не проводились, то оценку дисперсии  $S_{y(j)}^2$  можно получить лишь по  $S_r^2$ . Без повторных измерений  $F$ -критерий не может быть применен для проверки гипотезы линейности.

Далее можно проверить гипотезу о том, что  $\beta_1 = 0$ , составляя отношение оценок дисперсий:

$$F = \frac{S_3^2}{S_{y(j)}^2} = \frac{\sum_{j=1}^n P_j (\hat{y}(x_j) - \bar{y})^2}{S_{y(j)}^2}, \quad \text{где} \quad \bar{y} = \frac{\sum_{j=1}^n y_{ji}}{\sum_{j=1}^n P_j}.$$

Если это отношение больше табличного значения  $F(\rho, f_1, f_2)$ , гипотеза  $H_0: \beta_1 = 0$  отвергается (рис. 2.7).

### Понятие доверительного интервала. Доверительная вероятность.

Оценку неизвестного параметра генеральной совокупности одним числом называют точечной оценкой. Наряду с точечным оцениваем статистическая теория оценивания параметров занимается вопросами интервального оценивания.

Задачу интервального оценивания в самом общем виде можно сформулировать так: по данным выборки построим числовой интервал, относительно которого с заранее выбранной вероятностью можно сказать, что внутри этого интервала находится оцениваемый параметр. Интервальное оценивание особенно необходимо при малом числе наблюдений, когда точечная оценка мало надежна.

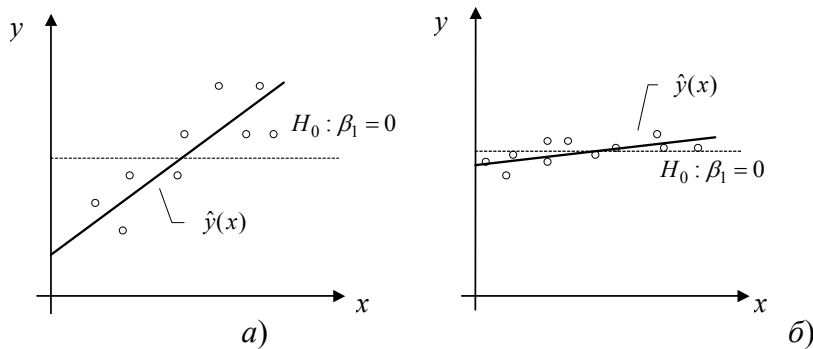


Рис. 2.7 К проверке гипотезы  $H_0: \beta_1 = 0$ :

$a$  – гипотеза отвергается;  $b$  – гипотеза принимается

Доверительным интервалом  $[\underline{b}, \bar{b}]$  для параметра  $b$  называют такой интервал, относительно которого можно с заранее выбранной вероятностью  $\rho = 1 - \alpha$  близкой к единице, утверждать, что он содержит значение параметра  $b$ , т.е.

$$P[\underline{b} < b < \bar{b}] = 1 - \alpha.$$

Чем меньше для выбранной вероятности  $[\underline{b}, \bar{b}]$ , тем точнее оценка неизвестного параметра  $b$  и, наоборот, если этот интервал велик, то оценка, произведенная с его помощью, мало пригодна для практики. Вероятность  $\rho = 1 - \alpha$  принято называть доверительной вероятностью, а число  $\alpha$  – уровнем значимости. Выбор доверительной вероятности определяется конкретно решаемой задачей.

Оценим значимость оценок коэффициентов регрессии и построим интервальные оценки этих коэффициентов. Для этого проверяют гипотезу о равенстве нулю коэффициента регрессии, соблюдая предпосылки нормального распределения  $b$  относительно  $\beta$ . В этом случае вычисляемая для проверки нулевой гипотезы  $H_0: \beta_1 = 0$  статистика  $t = |b - \beta/S_b|$  имеет распределение Стьюдента. Тогда для коэффициента  $\beta_0$  имеем:

$$t = \frac{b_0 - \beta_0}{S_{b_0}} = \frac{b_0 - \beta_0}{S_{y(j)} / \left( \sum_{j=1}^n P_j \right)^{1/2}}, \quad f = \sum_{j=1}^n P_j - 2.$$

Величину  $S_{y(j)}$  называют оценкой стандартной ошибки.

По доверительной вероятности  $1 - \alpha/2$  и числу степеней свободы  $f$  находят по таблицам распределения Стьюдента критическое значение  $t_{1-\alpha/2, f}$ . В этом случае доверительный интервал для  $\beta_0$  имеет вид

$$b_0 - t_{1-\alpha/2, f} S_{b_0} \leq \beta_0 < b_0 + t_{1-\alpha/2, f} S_{b_0}.$$

Аналогично для  $\beta_1$  имеем:

$$t = \frac{b_1 - \beta_1}{S_{b_1}} = \frac{b_1 - \beta_1}{S_{y(j)} / \left( \sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x})^2 \right)^{1/2}}, \quad f = \sum_{j=1}^n P_j - 2.$$

$$b_1 - t_{1-\alpha/2, f} S_{b_1} \leq \beta_1 < b_1 + t_{1-\alpha/2, f} S_{b_1}.$$

Линия регрессии характеризует изменение условного математического ожидания выходной переменной  $\tilde{y}$  от вариации входной переменной  $x$ . Точечной оценкой условного математического ожидания  $\eta = M\{\tilde{y} | x\}$  является  $\hat{y}(x)$ . Построим доверительный интервал для  $\eta = M\{\tilde{y} | x\}$  в точках  $x_j, j = \overline{1, n}$ .

Известно что  $(\hat{y}(x) - M\{\tilde{y} | x\}) / S_{\hat{y}}$  имеет распределение Стьюдента с  $f = \sum_{j=1}^n P_j - 2$  степенями свободы:

$$t = \frac{\hat{y} - \eta}{S_{\hat{y}}},$$

$$\hat{y} - t_{1-\alpha/2, f} S_{\hat{y}} \leq \eta < \hat{y} + t_{1-\alpha/2, f} S_{\hat{y}},$$

где

$$S_{\hat{y}(j)}^2 = S_{y(j)}^2 \left[ \frac{1}{\sum_{j=1}^n P_j} + \frac{\sum_{j=1}^n (x_j - \bar{x})^2}{\sum_{j=1}^n P_j (x_j - \bar{x})^2} \right].$$

Доверительные границы интервала для  $\eta = M\{\tilde{y} | x\}$  в точках  $x_j$  можно изобразить графически (рис. 2.8).



**Рис. 2.8 К понятию "точность" линейной регрессионной модели**

В точке  $x = \bar{x}$  границы интервала наиболее близки друг к другу. Расположение границ доверительного интервала показывает, что прогнозы по уравнению регрессии с заданной точностью (интервальные оценки для  $\eta$ ) допустимы для значений  $x$ , не выходящих за пределы выборки. Иными словами, экстраполяция по уравнению регрессии может приводить к значительным погрешностям.

### НЕЛИНЕЙНАЯ РЕГРЕССИЯ.

Пусть уравнение регрессии задается полиномом  $k$ -ой степени

$$\hat{y} = b_0 + b_1x + b_2x^2 + \dots + b_kx^k,$$

коэффициенты которого будем определять методом наименьших квадратов по экспериментальным данным.

Однако, нам неизвестна степень полинома  $k$ . Для ее определения используем итерационный метод: вначале задаемся степенью полинома, например  $k = 2$  и определяем коэффициенты полинома методом наименьших квадратов. Затем вычисляем остаточную дисперсию по формуле

$$S^2_{\text{ост}, k} = \frac{\sum_{j=1}^n (y_j - \hat{y}(x_j))^2}{n - (k + 1)}.$$

Далее увеличиваем заданную степень полинома  $k$  на 1 и повторяем выше описанную процедуру при увеличенном значении степени полинома. Как только  $S^2_{\text{ост}, k+1}$  перестает быть значимо меньше  $S^2_{\text{ост}, k}$ , увеличение степени  $k$  нужно прекратить. Значимость различия между  $S^2_{\text{ост}, k+1}$  и  $S^2_{\text{ост}, k}$  проверяется по критерию Фишера:

$$F = \frac{S^2_{\text{ост}, k}}{S^2_{\text{ост}, k+1}} < F(p, f_1, f_2),$$

где  $f_1, f_2$  – число степеней свободы остаточной дисперсии в числителе и знаменателе соответственно.

Если считать, что уравнение регрессии найдено с достаточной точностью, то остаточная дисперсия обусловлена только наличием дисперсии воспроизводимости, т.е.  $S^2_{\text{ост}} \approx S^2_{\text{воспр}}$ . Чем меньше доля  $S^2_{\text{ост}} \approx S^2_{\text{воспр}}$  в общей дисперсии  $S^2_y$ , тем сильнее связь между  $\tilde{y}$  и  $x$ , так как меньше доля случайности в этой связи. Силу связи между  $\tilde{y}$  и  $x$  можно охарактеризовать величиной:

$$\xi = \frac{[n - (k + 1)] S^2_{\text{ост}}}{(n - 1) S^2_y}, \quad S^2_y = \frac{\sum_{j=1}^n (y_j - \bar{y})^2}{n - 1}, \quad \bar{y} = \frac{\sum_{j=1}^n y_j}{n}.$$

Связь тем сильнее, чем меньше  $\xi$ . Величина  $\sqrt{1-\xi} = \Theta$  называется корреляционным отношением. Чем больше  $\Theta$ , тем сильнее связь,  $0 \leq \Theta \leq 1$ .

Если  $\Theta = 1$ , то существует функциональная зависимость между параметрами. Однако при  $\Theta = 0$  величины  $\tilde{y}$  и  $x$  нельзя считать независимыми, так как связь между ними, не сказываясь на дисперсиях, может проявить себя в моментах более высокого порядка. И только при нормальном распределении равенство нулю корреляционного отношения однозначно свидетельствует об отсутствии связи между случайными величинами. Корреляционное отношение, как и коэффициент корреляции в линейной регрессии, характеризует тесноту связи между случайными величинами. Анализ силы связи по  $\Theta$  называют корреляционным анализом.

### МНОЖЕСТВЕННАЯ РЕГРЕССИЯ.

Множественная регрессия применяется для описания взаимной связи входных величин  $x_1, x_2, \dots, x_m$  и выходной величины  $\tilde{y}$ . Уравнение линейной множественной регрессии имеет вид:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{i=1}^m b_i x_i,$$

где  $b_0, b_1, \dots, b_m$  – находятся методом наименьших квадратов:

$$b_i = r_{x_i y} \frac{S_y}{S_{x_i}}, \quad i = \overline{1, m}; \quad b_0 = \bar{y} - \sum_{i=1}^m b_i \bar{x}_i;$$

$$S_{x_i} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_i)^2}{n-1}}; \quad S_y = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^n (y_j - \bar{y})^2}{n-1}};$$

$$r_{x_i y} = \frac{1}{n-1} \sum_{j=1}^n (x_{ij} - \bar{x}_i)(y_j - \bar{y}) / (S_{x_i} S_y),$$

где  $r_{x_i y}$  – коэффициент корреляции, оценивающий тесноту линейной связи случайных величин  $x_i$  и  $y$ .

О степени силы связи  $x_1, x_2, \dots, x_m$  и  $\tilde{y}$  можно судить по величине коэффициента множественной линейной корреляции  $R_{x_1, x_2, \dots, x_m y}$ , которой всегда больше нуля и меньше единицы. Использование этой величины связано, однако, с опасностью получения неверных выводов – при увеличении  $m$  и неизменном числе опытных данных значение  $R \rightarrow 1$ , хотя теснота линейной зависимости может оставаться неизменной. Уравнение множественной нелинейной регрессии объекта  $O_m^Z$  задается обычно полиномом:

$$\hat{y} = b_0 + b_{11}x_1 + b_{12}x_2 + \dots + b_{1m}x_m + b_{21}x_1^2 + b_{22}x_2^2 + \dots + b_{2m}x_m^2 +$$

$$+ c_{12}x_1x_2 + c_{13}x_1x_3 + \dots + c_{1m}x_1x_m + c_{23}x_2x_3 + c_{24}x_2x_4 + \dots$$

$$+ c_{2m}x_2x_m + \dots + d_{11}x_1^3 + d_{12}x_2^3 + \dots + d_{1m}x_m^3 + \dots$$

Коэффициенты уравнения определяются методом наименьших квадратов и не имеют статистической трактовки. Наибольшие трудности вызывает выбор порядков полинома по каждой из переменных, а также вычисление определителя плохо обусловленной матрицы, часто встречающееся при нахождении коэффициентов уравнения. Поэтому целесообразно при построении модели нелинейной множественной регрессии применять нейронные сети.

### 2.1.3 Экспертные оценки

Когда нет возможности определить значения тех или иных параметров экспериментально или выбрать из ранее зарегистрированных данных, приходится полагаться на субъективные оценки. В подобных случаях чаще всего желательно воспользоваться мнением коллектива экспертов, а не отдельного лица. Такой коллектив должен состоять из специалистов, обладающих глубокими знаниями моделируемого процесса и по возможности облеченных правом принимать ответственные решения.

Выявление индивидуальных точек зрения и формирование на их основе единого мнения коллектива экспертов можно осуществлять несколькими методами, но, пожалуй, самым полезным из них является метод Дельфи [11]. Это итерационная процедура, которая позволяет подвергать мнение каждого эксперта критике со стороны всех остальных, не заставляя их фактически сталкиваться лицом к лицу. Идея метода заключается в том, чтобы создать механизм, обеспечивающий сохранение анонимности точек зрения отдельных лиц и тем самым свести к минимуму влияние красноречивых и обладающих даром убеждать личностей на поведение группы в целом. Все взаимодействия между членами группы находятся под контролем со стороны координатора или руководящего звена, направляющего всю деятельность группы. Групповая оценка вычисляется им путем некоторого усреднения (обычно посредством нахождения среднего значения или медианы) и доводится до сведения всех членов группы.

Рассмотрим в качестве примера задачу определения значения некоторого числа  $N$ . Пусть в группе экспертов будет 12 членов. Метод Дельфи предполагает следующий способ действий.

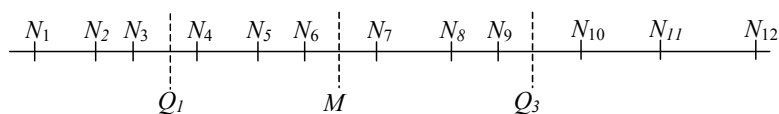
- 1 Опросить каждого члена группы по отдельности, какова его оценка числа  $N$ .
- 2 Разложить ответы на общей шкале в порядке возрастания значений и определить квартили  $Q_1$ ,  $M$ ,  $Q_3$  таким образом, чтобы в каждом из четырех отрезков шкалы содержалась четвертая часть всех оценок. Результат при 12 членах группы будет выглядеть так, как показано на рис. 2.9.

- 3 Сообщить каждому из членов группы значения  $Q_1$ ,  $M$  и  $Q_3$  и попросить его пересмотреть свою оценку, а если его новая оценка ниже  $Q_1$  или выше  $Q_3$ , попросить его кратко обосновать свое мнение.

- 4 Подсчитать результаты второго тура и сообщить членам группы новые значения  $Q_1$ ,  $M$  и  $Q_3$  (обычно эти значения будут иметь меньшую дисперсию, чем после первого тура) вместе с письменными обоснованиями предельных значений (сохраняя при этом анонимность мнений). Попросить каждого из представивших письменные ответы учесть новые данные и аргументацию и при желании пересмотреть свою предыдущую оценку. Если в этом третьем туре пересмотренная оценка у данного члена группы будет ниже  $Q_1$  или выше  $Q_3$ , попросить его кратко обосновать, почему он счел не заслуживающими внимания аргументы, которые могли бы его заставить сместить свою оценку ближе к средней.

- 5 Повторять эту процедуру столько раз, сколько представляется желательным координатору, или пока промежуток между  $Q_1$  и  $Q_3$  сузится до некоторой заранее установленной величины. Для этого обычно требуется всего три или четыре тура, поскольку аргументы скоро начинают повторяться. Далее берется медиана как представляющая групповое мнение относительно того, каким должно быть значение  $N$ .

Возможны и другие варианты метода Дельфи. Этот метод, предполагающий анонимность мнений, итеративную процедуру обработки результатов, управляемую обратной связью, числовые оценки и статистическое определение групповой оценки, может стать ценным инструментом исследования для разработчиков имитационных моделей.



**Рис. 2.9 Результаты оценок по методу Дельфи**

### **3 АНАЛИТИЧЕСКИЙ МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ МОДЕЛЕЙ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ**

Аналитическая модель технологического объекта обычно состоит из четырех групп уравнений: 1) материального и теплового баланса; 2) гидродинамики потоков; 3) термодинамического равновесия (для отсчета движущей силы процесса); 4) скоростей протекающих процессов (химических реакций, тепло- и массопередачи и др.). Уравнения второй и, особенно часто, третьей группы могут входить в математическую модель неявно.



Методика построения аналитического описания статики и динамики технологических объектов включает следующие этапы [5]:

1 *Изучение объекта.* На данном этапе производится ознакомление с конструкцией технологического объекта и изучение протекающих в нем физико-химических процессов (химического превращения, диффузии, теплопередачи и др.).

2 *Составление структурной схемы объекта.* Исследуемый объект условно разделяется на ряд подсистем. В качестве подсистем в технологических объектах обычно выделяют звенья, которые или являются повторяющимися элементами конструкции аппарата (например, царга колонного аппарата, тарелка в ректификационной колонне, реактор-мешалка в каскаде реакторов и т.п.), или отличаются от других звеньев типом лимитирующего процесса, или конструктивно представляют самостоятельную часть установки. Следует понимать, что "глубина" декомпозиции объекта на звенья зависит от уровня наших знаний о процессах, реальной возможности определения неизвестных параметров, возможности решения полученных систем уравнений, целевого назначения математических моделей статики и динамики.

С проблемой рациональной декомпозиции технологического объекта на звенья тесно связана задача принятия системы допущений. В общем случае обсуждаются и затем принимаются или отвергаются следующие важнейшие допущения: о стационарности процессов в звене; о сосредоточенности или распределенности параметров; об (не)учете тех или иных физико-химических явлений, имеющих место в данном звене.

**В целом вся система допущений направлена, как правило, на упрощение и обоснование принятой структурной схемы исследуемого объекта. Допущения представляют компромисс между требуемой и желаемой точностью описания статических и динамических свойств объекта и возможностью как количественной оценки физико-химических явлений, так и решения получающихся уравнений математического описания.**

3 *Составление математического описания отдельных звеньев.* Для бесконечно малых объемов звена и промежутка времени записываются уравнения теплового и материального баланса в интегральной форме. Затем с помощью теорем "о среднем" и "конечных приращений" осуществляется переход к дифференциальной форме [12]. В математическое описание звена входят граничные условия для дифференциальных уравнений и связи с другими, соседними, звеньями для конечных уравнений.

4 *Определение параметров модели звена.* Для нахождения коэффициентов и других параметров уравнений необходимо знать физико-химические свойства перерабатываемых веществ, константы скоростей химических реакций, коэффициенты диффузии, теплопередачи и т.д. Разумеется, необходимо знать все определяющие геометрические размеры звеньев.

Часть интересующей нас информации можно найти в соответствующей технической и научной литературе, для определения же некоторых коэффициентов и констант требуется постановка специальных лабораторных исследований.

5 *Составление и анализ уравнений модели всего технологического объекта.* В математическое описание всего объекта входят уравнения отдельных звеньев и связей между ними, граничные и начальные условия, а также ограничения на диапазоны изменения входных и выходных переменных.

6 *Выбор методов и разработка вычислительных алгоритмов решения уравнений математической модели.*

7 *Оценка точности математического описания объекта.* Точность описания статических и динамических свойств объекта аналитически составленными уравнениями может оцениваться величиной одного из приведенных ниже показателей

$$\Phi = \frac{1}{nd} \sum_{i=1}^n \sum_{\beta=1}^d \omega_{i\beta} (y_{i\beta} - y_{i\beta}^0)^2; \quad \Phi = \int_0^{t_1} \sum_{i=1}^n \sum_{\beta=1}^d \omega_{i\beta} dt |y_{i\beta}(t) - y_{i\beta}^0(t)|^2.$$

где  $\omega_{i\beta}$  – весовые множители.

Для вычисления  $\Phi_1, \Phi_2$  на объекте проводится активный или пассивный эксперимент, заключающийся в регистрации  $d$  различных значений входных и соответствующих им установившихся значений (статика) или переходных процессов (динамика) выходных  $y_{i\beta}^0$  переменных. Желательно, чтобы независимые переменные варьировались во всем диапазоне, допустимом технологическим регламентом. Весовые

вые множители  $\omega_{i\beta}$  вводятся в функцию невязки для создания возможности сравнения разнородных переменных при неравноточных их измерениях. Чем больше погрешность измерения  $y_{i\beta}^3$ , тем меньше выбирается множитель  $\omega_{i\beta}$ . В практических задачах далеко не всегда известны ошибки измерения  $y_{i\beta}^3$ , что делает невозможным объективный выбор весовых множителей.

При достаточно больших значениях  $\Phi_1, \Phi_2$  математическое описание считается не адекватным объекту. В этом случае требуется изменение структурной схемы объекта, т.е. включение в рассмотрение новых звеньев, либо уточнение отдельных "сомнительных" параметров уравнений. Эта операция может осуществляться постановкой дополнительных лабораторных опытов.

Вопрос о том, при каком "критическом" значении  $\Phi_1, \Phi_2$  считать математическое описание адекватным объекту, а при каком требовать уточнения уравнений, является исключительно сложным и, вероятно, не имеет однозначного ответа. Выбор такого "критического" значения функций невязок  $\Phi_1, \Phi_2$  тесно связан с целевым назначением математического описания, а также с представительностью выборки  $y_{i\beta}^3$ .

В частном случае, когда  $y_{i\beta}^3$  – независимые случайные величины (процессы), для оценки случайного (неслучайного) характера расхождений между решениями уравнений модели и опытными данными могут быть использованы статистические критерии значимости и согласия [6, 7].

### 3.1 Математическое описание структуры потоков в технологическом аппарате

Математические модели структуры потоков в технологическом аппарате являются основой, на которой строится математическое описание любого технологического процесса [13]. Однако, точное описание реальных потоков (например, с помощью уравнения Навье-Стокса) приводит к чрезвычайно трудным для постановки и решения задачам. Поэтому разработанные к настоящему времени модели структуры потоков в аппаратах носят полуэмпирический характер. Тем не менее, они позволяют получить модели, с достаточной для практики точностью отражающие физические процессы.

При осуществлении технологических процессов необходимо знать степень полноты их завершения, которая зависит от времени пребывания частиц (элементов, долей) потока по их времени пребывания в аппарате, которое, разумеется, неравномерно и имеет стохастическую природу. Наиболее существенными источниками неравномерности распределения частиц потока по их времени пребывания в промышленных аппаратах являются: 1) неравномерность профиля скоростей потока; 2) турбулизация потоков; 3) наличие застойных областей в аппарате; 4) каналобразование, байпасные и перекрестные токи в аппарате; 5) температурные градиенты движущихся сред (потоков); 6) тепло- массообмен между фазами и т.п.

Для процессов массопередачи описание структуры потоков в аппаратах важно еще и потому, что позволяет установить перемещение и распределение веществ, находящихся в этих потоках. Поэтому все уравнения гидродинамических моделей потоков составляются преимущественно относительно изменения концентрации вещества в потоке.

#### *Экспериментальный (импульсный) метод исследования структуры потоков в аппарате.*

Сущность экспериментального метода исследования структуры потоков в реальном аппарате заключается в том, что в поток на входе его в аппарат каким-либо способом вводят индикатор, а на выходе потока из аппарата регистрируют изменение концентрации индикатора в зависимости от времени. Полученную таким образом функцию отклика аппарата на ввод индикатора (типовое возмущение по составу потока) обрабатывают по специальной методике и получают нормированную функцию распределения частиц (элементов, долей) потока по их времени пребывания в технологическом аппарате, которую в дальнейшем используют в расчетах технологических процессов и аппаратов или для

построения близкой к реальной гидродинамической модели, составленной из комбинации типовых моделей гидродинамики (*идеального смешения и вытеснения, диффузионной модели, ячеечной модели и т.п.*).

Если принятая модель соответствует реальной структуре потоков, то экспериментальная функция отклика может рассматриваться как график решения уравнений модели при соответствующих начальных и граничных условиях. Сравнивая решение уравнений модели с экспериментальной функцией отклика на типовые (например, импульсные) возмущения, можно определить неизвестные параметры модели.

В качестве индикаторов используют растворы солей и кислот, изотопы, реже красители и другие вещества, которые не вступают во взаимодействие с веществами основного потока и могут быть измерены с помощью приборов. Ввод индикаторов осуществляют в виде стандартных сигналов: импульсного, ступенчатого, циклического и т.п.

Рассмотрим импульсный метод исследования структуры потока в аппарате, в соответствии с которым определенное количество индикатора на входе в аппарат вводят в виде дельта функции.

**Определение.** Импульсной  $\delta$ -функцией называется функция, равная нулю всюду, кроме начала координат, принимающая бесконечное значение в начале координат, и при этом интеграл от нее равен единице:

$$\delta(t) = \begin{cases} 0 & \text{при } t \neq 0; \\ \infty & \text{при } t = 0, \end{cases} \quad \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(t) dt = 1 \text{ при любом } \varepsilon > 0.$$

Предположим, что с помощью специального устройства в поток на входе в аппарат практически мгновенно ввели определенное количество  $q$  индикатора и определили (с помощью регистрирующего прибора) функцию отклика на это импульсное возмущение, изображенную на рис. 3.1

Построим экспериментальную кривую  $C^{\partial}(t)$  в координатах  $C(\theta) - \theta$ , где  $\theta = \frac{t}{\bar{t}}$  – безразмерное время,  $\bar{t}$  – среднее время пребывания элементов потока в аппарате. Для этого необходимо вначале определить нормированную  $C$ -кривую по формуле:  $C(t) = \frac{C^{\partial}(t)}{\int_0^{\infty} C^{\partial}(t) dt}$  и затем вычислить  $C(\theta) = C(t) \bar{t}$ .

Среднее время пребывания элементов потока в аппарате представляет собой случайную величину и по определению его можно вычислить следующим образом:



$$\bar{t} = \int_0^{\infty} t C(t) dt .$$

Рис. 3.1 Типичная функция отклика аппарата на импульсное возмущение

Получив, таким образом, нормированную  $C$ -кривую (ПРВП элементов потока), мы теперь фактически можем распределить всю совокупность элементов (долей) потока по их времени пребывания в аппарате. В самом деле, доля потока, время пребывания которой в аппарате изменяется от  $\theta$  до  $\theta + \Delta\theta$ , равна величине

$$\int_{\theta}^{\theta + \Delta\theta} C(\theta) d\theta . \text{ Естественно, что}$$

$$\int_0^{\infty} C(\theta) d\theta = 1 .$$

Все многообразие структур потоков в аппарате можно формализовать с помощью тех или иных комбинаций типовых математических моделей: идеального смешения, идеального вытеснения, диффузионной, ячеечной, комбинированной и т.п. Рассмотрим эти модели более подробно.

*Модель идеального смешения.*

Модель идеального смешения соответствует гидродинамике аппарата, в котором поступающий в него индикатор мгновенно распределяется по всему его объему, т.е. в каждой точке аппарата и на выходе из него концентрации индикатора будут равны.

Уравнение модели идеального смешения представляет собой дифференциальное уравнение первого порядка

$$V \frac{dc}{dt} = G(c^{bx} - c), \tag{3.1}$$

с начальным условием

$$c(0) = c_n = \frac{q}{V}, \tag{3.2}$$

где  $V$  – объем аппарата;  $c^{bx}$  – концентрация индикатора в потоке на входе в аппарат;  $G$  – объемная скорость (расход) потока, поступающего и выходящего из аппарата идеального перемешивания;  $q$  – количество мгновенно введенного индикатора в поток на входе в аппарат;  $c$  – концентрация индикатора в аппарате (зона идеального перемешивания) и на выходе из него.

При импульсном вводе индикатора он мгновенно распределяется по всему объему аппарата и начинается его "вымывание", при этом начальная концентрация индикатора в аппарате равна  $c_n = q/V$ . Отклик модели идеального смешения на импульсное возмущение (решение дифференциального уравнения (3.1) с начальным условием (3.2) соответствует убывающей экспоненциальной зависимости (рис. 3.2) и имеет вид:  $c(t) = c_n e^{-t/\bar{t}}$ .

*Модель идеального вытеснения.*

В основе модели идеального вытеснения лежит допущение о поршневом течении потока без перемешивания в продольном направлении при равномерном распределении индикатора в направлении, перпендикулярном движению. Время пребывания всех элементов потока в таком (например, трубчатом) аппарате одинаково.

Уравнение модели идеального вытеснения записывается в виде дифференциального уравнения с частными производными

$$\frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial \ell} = 0, \tag{3.3}$$

решение которого должно удовлетворять начальному условию

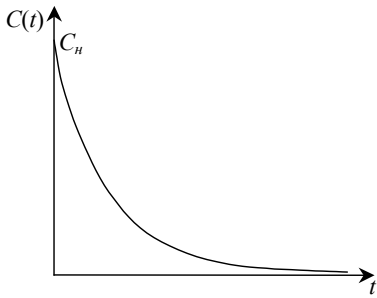
$$c(0, \ell) = c_n(\ell) \quad \text{при} \quad t = 0, \quad 0 \leq \ell \leq L, \tag{3.4}$$

и граничному условию

$$c(t, 0) = c^{\text{вх}}(t) = \frac{q}{V} \delta(t) \quad \text{при} \quad x = 0, t > 0. \quad (3.5)$$

Отклик модели идеального вытеснения на импульсное возмущение (решение дифференциального уравнения (3.3) с условиями (3.4), (3.5)) приведен на рис. 3.3 и имеет вид:

$$c^{\text{вых}}(t) = c(t, L) = \begin{cases} c_{\text{н}}(L - tv), & t < \frac{L}{v}; \\ c^{\text{вх}}\left(t - \frac{L}{v}\right), & t \geq \frac{L}{v}. \end{cases}$$



аппарата;  $v$  –

Из решения следует, что любое изменение концентрации индикатора на входе в аппарат идеального *вытеснения* появляется на его выходе через время равное среднему времени пребывания  $\bar{t} = \frac{L}{v}$ , где  $L$  – длина

скорость потока.

**Рис. 3.2.** Функция отклика при идеальном перемешивании входящего в него потока



**Рис. 3.3** Отклик модели идеального вытеснения на импульсное возмущение

*Диффузионная модель.*

В основе диффузионной модели лежит допущение о том, что структура потоков в аппарате описывается уравнением, аналогичным уравнению молекулярной диффузии. Основой данной модели служит модель идеального вытеснения, осложненная обратным перемешиванием, описываемым формальным законом диффузии.

При составлении однопараметрической диффузионной модели принимаются следующие допущения: изменение концентрации субстанции является непрерывной функцией координаты (расстояния); концентрация субстанции в данном сечении постоянна; объемная скорость потока и коэффициент продольного перемешивания не изменяются по длине и сечению потока. При таких допущениях уравнение диффузионной модели представляет дифференциальное уравнение с частными производными параболического типа

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial \ell} + D_\ell \frac{\partial^2 c}{\partial \ell^2}. \quad (3.6)$$

Уравнение (3.6) отличается от уравнения (3.3) введением дополнительного члена  $D_\ell \frac{\partial^2 c}{\partial \ell^2}$ , учитывающего турбулентную диффузию или перемешивание.

*Вывод уравнения (3.6).* Согласно закону Нернста масса вещества  $dq$ , протекающая через сечение  $\ell$  за промежуток времени  $(t, t + \Delta t)$ , равна

$$dq = -D_\ell \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial \ell} S dt,$$

где  $S$  – площадь поперечного сечения аппарата.

По определению концентрации, количество вещества  $q$  с концентрацией  $c$  в объеме  $V$  равно

$$q = cV,$$

отсюда получаем, что изменение массы вещества на участке аппарата  $(\ell_1, \ell_2)$  при изменении концентрации на  $\Delta c$  равно

$$\Delta q = \int_{\ell_1}^{\ell_2} \Delta c S d\ell.$$

Составим уравнение баланса массы вещества на участке  $(\ell_1, \ell_2)$  за промежуток времени  $(t_1, t_2)$ :

$$S \int_{t_1}^{t_2} \left[ D_\ell(\ell_2) \frac{\partial c(\ell_2, t)}{\partial \ell} - D_\ell(\ell_1) \frac{\partial c(\ell_1, t)}{\partial \ell} \right] dt - \quad (3.7)$$

$$- S v \int_{t_1}^{t_2} [c(\ell_2, t) - c(\ell_1, t)] dt = S \int_{\ell_1}^{\ell_2} [c(\ell, t_2) - c(\ell, t_1)] d\ell,$$

которое представляет собой уравнение диффузии в интегральной форме.

Чтобы получить уравнение диффузии в дифференциальной форме, предположим, что функция  $c(\ell, t)$  имеет непрерывные производные  $c_{\ell\ell}$ ,  $c_t$ . Требуя дифференцируемости функции  $c(\ell, t)$ , мы можем потерять ряд возможных решений, удовлетворяющих дифференциальному уравнению. Однако, в случае уравнений диффузии и теплопроводности мы фактически не теряем возможных решений, так как можно доказать, что если функция удовлетворяет уравнению (3.7), то она обязательно должна быть дифференцируема [12].

Пользуясь теоремой о среднем получаем равенство:

$$\left[ D_\ell \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial \ell} \Big|_{\ell=\ell_2} - D_\ell \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial \ell} \Big|_{\ell=\ell_1} \right]_{t=t_1}^{t=t_2} \Delta t -$$

$$- \left[ v (c(\ell, t) \Big|_{\ell=\ell_2} - c(\ell, t) \Big|_{\ell=\ell_1}) \right]_{t=t_1}^{t=t_2} \Delta t = [c(\ell, t_2) - c(\ell, t_1)]_{\ell=\ell_1}^{\ell=\ell_2} \Delta \ell,$$

которое с помощью теоремы о конечных приращениях можно преобразовать к виду

$$\frac{\partial}{\partial \ell} \left[ D_\ell \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial t} \right]_{\ell=\ell^2}^{t=t^1} \Delta t \Delta \ell - \left[ v \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial \ell} \right]_{\ell=\ell^3}^{t=t^2} \Delta t \Delta \ell = \left[ \frac{\partial c}{\partial t} \right]_{t=t^3}^{t=t^1} \Delta t \Delta \ell,$$

где  $t^1, t^2, t^3, \ell^1, \ell^2, \ell^3$  – промежуточные точки интервалов  $(t_1, t_2)$  и  $(\ell_1, \ell_2)$ .

Отсюда, после сокращения на произведение  $\Delta t \Delta \ell$  находим

$$\frac{\partial}{\partial \ell} \left[ D_\ell \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial t} \right]_{\ell=\ell^2}^{t=t^1} - v \frac{\partial c(\ell, t)}{\partial \ell} \Big|_{\ell=\ell^3}^{t=t^2} = \frac{\partial c}{\partial t} \Big|_{t=t^3}^{t=t^1}.$$

Все наши рассуждения относились к произвольным интервалам  $(t_1, t_2)$  и  $(\ell_1, \ell_2)$ . Переходя к пределу, при  $\ell_1, \ell_2 \rightarrow \ell$  и  $t_1, t_2 \rightarrow t$ , получим дифференциальное уравнение диффузии

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial \ell} + D_\ell \frac{\partial^2 c}{\partial \ell^2}. \quad (3.8)$$

Далее остановимся на начальных и граничных условиях. В качестве начального условия обычно задается профиль концентрации индикатора по длине аппарата в начальный момент времени:

$$c(0, \ell) = c_n(\ell) \quad \text{при} \quad t = 0. \quad (3.9)$$

Граничные условия обычно задают из условия выполнения материальных балансов на концах аппарата (условия по Данквертсу). Рассмотрим левый конец трубчатого аппарата, в который поступает поток с некоторой средней скоростью  $v$  (рис. 3.4). Сумма потоков веществ, подходящих к границе  $\ell = 0$ , должна быть равна потоку вещества, отходящего от границы, т.е.

$$vc^{\text{BX}} + D_\ell \frac{dc}{d\ell} = vc, \quad \text{или} \quad v(c^{\text{BX}} - c) + D_\ell \frac{dc}{d\ell} = 0. \quad (3.10)$$

Аналогично для правого конца аппарата имеем

$$v(c - c^{\text{ВЫХ}}) = D_\ell \frac{dc}{d\ell}. \quad (3.11)$$

На практике часто принимают  $c \approx c^{\text{ВЫХ}}$ . С учетом этого граничное условие (3.11) примет вид

$$\frac{dc}{d\ell} = 0. \quad (3.12)$$

Условия (3.10) – (3.12) называются граничными условиями по Данквертсу.

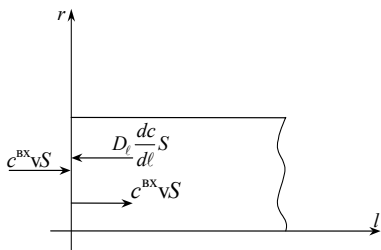


Рис. 3.4 Схема потоков у левого конца аппарата

Наряду с рассмотренной выше однопараметрической диффузионной моделью используется двухпараметрическая диффузионная модель. Отличие ее состоит в том, что перемешивание потока учитывается как в продольном, так и в радиальном направлениях. Параметрами модели являются коэффициенты продольного  $D_\ell$  и радиального  $D_r$  перемешивания. Будем считать, что коэффициенты  $D_\ell$  и  $D_r$  не изменяются по длине и сечению аппарата, а скорость потока постоянна. В этом случае уравнение двухпараметрической диффузионной модели при движении потока в аппарате цилиндрической формы имеет вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v \frac{\partial c}{\partial \ell} + D_\ell \frac{\partial^2 c}{\partial \ell^2} + \frac{D_r}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial c}{\partial r} \right), \quad (3.13)$$

с начальным и граничным условиями, например:

$$c(0, \ell, r) = 0 \quad \text{при } t = 0, \quad (3.14)$$

$$c(t, 0, 0) = c_0 \delta(0) \quad \text{при } \ell = 0, r = 0, \quad (3.15)$$

$$\frac{\partial c(t, \ell, R)}{\partial r} = 0 \quad \text{при } r = R, \quad (3.16)$$

$$vc(t, 0, r) - D_\ell \frac{\partial c(t, 0, r)}{\partial \ell} = 0 \quad \text{при } \ell = 0, \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial c(t, L, r)}{\partial \ell} = 0 \quad \text{при } \ell = L. \quad (3.18)$$

Ячеечная модель впервые предложена для описания гидродинамики каскада реакторов с мешалками. При ее построении поток условно разбивают на ряд последовательно соединенных между собой зон (ячеек) (рис. 3.5).

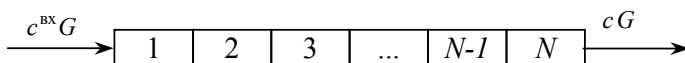


Рис. 3.5 Схема ячейечной модели гидродинамики аппарата:

$c^{BX}$ ,  $c$  – концентрации на входе и выходе из аппарата;

$G$  – объемный расход вещества через аппарат

Сделаем следующие допущения: 1) в каждой ячейке осуществляется идеальное перемешивание; 2) между ячейками отсутствует обратное перемешивание.



В этом случае параметром ячеечной модели служит число ячеек  $N$  идеального перемешивания: с увеличением  $N$  структура потока в аппарате приближается к гидродинамической модели идеального вытеснения, а с уменьшением  $N$  – к модели идеального смешения.

Запишем уравнения материального баланса для каждой из ячеек:

$$V_i \frac{dc_i}{dt} = G(c_{i-1} - c_i), \quad i = 1, 2, 3 \dots, \quad c_0 = c^{\text{вх}}. \quad (3.19)$$

Соответствующие начальные условия для системы уравнений (3.19) имеют вид:

$$c_1 = c_{1\text{н}}; c_2 = c_{2\text{н}}, \dots, c_N = c_{N\text{н}}, \quad \text{при } t = 0. \quad (3.20)$$

Рассмотрим отклик ячеечной модели гидродинамики аппарата на импульсное возмущение (для простоты предположим, что ячейки имеют одинаковый объем  $V$ ).

*Первая ячейка.*

Концентрация индикатора  $c^{\text{вх}}$  на входе в аппарат при импульсном возмущении равна нулю. В этом случае уравнение модели примет вид

$$V_i \frac{dc_1}{dt} = -Gc_1 \quad \text{или} \quad \bar{t} \frac{dc_1}{dt} = -c_1,$$

где 
$$\bar{t} = \frac{V}{G}, \quad c_1(0) = c_{1\text{н}}.$$

Его решение можно записать в виде (3.2)

$$c_1 = c_{1\text{н}} e^{-t/\bar{t}}.$$

*Вторая ячейка.*

Входом во вторую ячейку является выход из первой ячейки, т.е.  $c_2^{\text{вх}} = c_{1\text{н}} e^{-t/\bar{t}}$ . Тогда для второй ячейки модель гидродинамики записывается в виде

$$\bar{t} \frac{dc_2}{dt} = c_{1\text{н}} e^{-t/\bar{t}} - c_2; \quad c_2(0) = 0.$$

Получим решение этого дифференциального уравнения. Вначале решаем соответствующее однородное уравнение

$$\bar{t} \frac{dc_2}{dt} = -c_2,$$

которое после разделения переменных примет вид

$$c_2(t) = A(t) e^{-t/\bar{t}}.$$

Для нахождения неизвестного множителя  $A(t)$  подставим полученное решение однородного уравнения в исходное уравнение модели

$$\bar{t} \left[ \frac{dA(t)}{dt} e^{-t/\bar{t}} - \frac{A(t)}{\bar{t}} e^{-t/\bar{t}} \right] = c_{1H} e^{-t/\bar{t}} - A(t) e^{-t/\bar{t}}.$$

После приведения подобных членов приходим к дифференциальному уравнению относительно  $A(t)$

$$\bar{t}_2 \frac{dA(t)}{dt} = c_{1H}.$$

Его решение можно записать в виде

$$A(t) = \frac{c_{1H}}{\bar{t}} t + k.$$

Учитывая начальное условие

$$c_2(0) = A(0) e^{-0/\bar{t}} = A(0) = \frac{c_{1H}}{\bar{t}} 0 + k = 0.$$

Получаем  $k = 0$  и решение исходной задачи примет

$$c_2(t) = c_{1H} \frac{t}{\bar{t}_2} e^{-t/\bar{t}}.$$

Аналогичные решения можно получить для третьей, четвертой, ...,  $N$ -й ячейки. Функция отклика  $N$ -й ячейки, представляющая общую функцию отклика ячеечной модели, описывается выражением вида:

$$c_N(t) = c_{1H} \left( \frac{t}{\bar{t}} \right)^{N-1} \frac{1}{(N-1)!} e^{-t/\bar{t}}.$$

Вводя безразмерные концентрацию  $c = \frac{c_N}{c_{1H}}$  и время  $\tau = \frac{t}{\bar{t}}$ , функцию отклика можно представить в безразмерном виде [13]

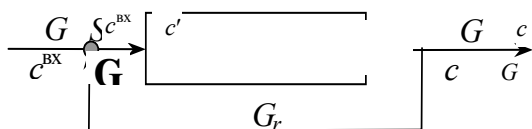
$$c(\tau) = \frac{N^N \tau^{N-1}}{(N-1)!} e^{-N\tau}.$$

*Ячеечная модель с обратными потоками (рециркуляционная модель).*



С другой стороны, если среднее время пребывания некоторой части элементов потока составляет  $0,1 - 0,3$  от времени пребывания основного потока, то считается, что в аппарате имеется байпасный поток. В основе обоих типов неравномерности (неоднородности) времени пребывания элементов потока лежит, по существу, одно и то же физическое явление – движение отдельных частей потока, обособленных друг от друга различными объемными скоростями.

Рассмотрим явление рециркуляции потока с выхода на вход аппарата (рис. 3.7).



**Рис. 3.7 Структура потока в аппаратуре с рециркуляцией**

Составим уравнение материального баланса для узла  $s$ :

$$c^{BX}G + cG_r = c'(G + G_r).$$

Применим к последнему уравнению преобразование Лапласа:

$$G + L\{c\}G_r = L\{c'\}(G + G_r).$$

Обозначим отношение расхода рециркуляционного потока  $G_r$  к основному  $G$  через  $R$ . Тогда разделив последнее уравнение на  $L\{c\}G$ , получим

$$\frac{1}{L\{c\}} + R = (1 + R) \frac{L\{c'\}}{L\{c\}}. \quad (3.23)$$

Отношение  $\frac{L\{c\}}{L\{c'\}}$  при нулевых начальных условиях представляет собой передаточную функцию  $W(p)$  аппарата без учета рецикла. Предположим, что эта передаточная функция соответствует модели идеального смешения.

$$W(p) = \frac{1}{1 + \bar{t}p},$$

где  $\bar{t}$  – среднее время пребывания элементов потока без учета рецикла.

Тогда, уравнение (3.23) переписывается в виде

$$\frac{1}{L\{c\}} + R = (1 + R)(1 + \bar{t}p),$$

откуда 
$$L\{c\} = \frac{1}{(1+R)(1+\bar{t}p) - R} = \frac{1}{1+(1+R)\bar{t}p}.$$

Для импульсного возмущения на входе передаточная функция аппарата с рециклом  $W_r(p)$  равна  $L\{c\}$ , следовательно,

$$W_r(p) = \frac{1}{1+(1+R)\bar{t}p}.$$

Определим среднее время пребывания  $\bar{t}_r$  и дисперсию  $\sigma^2$  функции отклика аппарата с рециклом, используя передаточную функцию  $W_r(p)$ . Запишем выражение для первого начального момента нормированной  $C$ -кривой

$$M_1' = \bar{t}_r = -W_r'(p=0) = (1+R)\bar{t}.$$

Таким образом, среднее время пребывания в аппарате с рециклом в  $(1+R)$  – раз больше среднего времени пребывания при отсутствии рецикла.

*Комбинированные модели, составленные из последовательно соединенных моделей идеального смешения и идеального вытеснения.*

В такой комбинированной системе можно выделить два варианта соединения моделей (рис. 3.8)

Оценим, как влияет порядок соединения моделей на отклик системы на ступенчатое возмущение? Рассмотрим следующий пример. Пусть в аппарате протекает химическая реакция  $A \xrightarrow{k} B$  первого порядка со скоростью

$$\frac{dc}{dt} = -kc,$$

где  $c$  – концентрация вещества  $A$ .

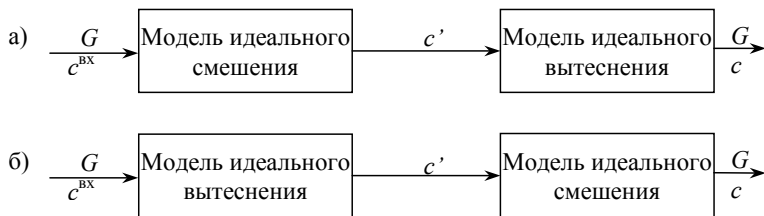
Сравним концентрации вещества  $A$  на выходе аппарата, модель гидродинамики которого представлена на рис. 3.8, *а*, *б*.

Рассмотрим комбинированную систему на рис. 3.8, *а*. Для зоны идеального смешения имеем

$$V_{\text{см}} \frac{dc'}{dt} = G(c' - c^{\text{вх}}),$$

где  $V_{\text{см}}$  – объем зоны идеального смешения, и  $-V_{\text{см}}kc' = G(c' - c^{\text{вх}})$ .

Следовательно, концентрация вещества  $A$  на выходе из зоны идеального смешения составит



**Рис. 3.8 Комбинированные модели**

$$c' = \frac{c^{BX}}{1 + kV_{CM}/G} = \frac{c^{BX}}{1 + k\bar{t}_{CM}}$$

В зоне идеального вытеснения изменение концентрации описывается уравнением вида

$$v \frac{dc}{dl} = -kc,$$

где  $v$  – линейная скорость движения потока в аппарате.

Интегрируя левую часть уравнения в пределах от  $c'$  до  $c$  по концентрации и от 0 до  $L$  по координате  $l$  ( $L$  – длина зоны вытеснения), получим

$$c = c' e^{-k\bar{t}_{\text{выт}}}, \quad \text{где} \quad \bar{t}_{\text{выт}} = L/v.$$

Таким образом, концентрация  $c$  на выходе комбинированной системы "идеальное смешение – идеальное вытеснение" выражается формулой

$$c = \frac{c^{BX} e^{-k\bar{t}_{\text{выт}}}}{1 + k\bar{t}_{CM}}$$

Рассмотрим теперь комбинированную систему на рис. 3.8, б. Здесь концентрация  $c'$  в зоне идеального вытеснения определяется уравнением

$$v \frac{dc'}{dl} = -kc',$$

решение которого имеет вид

$$c' = c^{BX} e^{-k\bar{t}_{\text{выт}}}.$$

В зоне идеального смешения изменение концентрации составляет

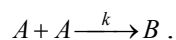
$$V_{CM} kc = G(c' - c),$$

откуда следует

$$c = \frac{c^{BX} e^{-k\bar{t}_{\text{выт}}}}{1 + k\bar{t}_{CM}}.$$

Таким образом, для химических реакций первого порядка (с линейной кинетикой) концентрация веществ на выходе комбинированных систем (рис. 3.8 *а, б*) одна и та же и, следовательно, порядок следования моделей (зон идеального смешения и вытеснения) не оказывает влияния на протекание процесса.

Рассмотрим осуществление химической реакции с нелинейной кинетикой:



Скорость протекания химической реакции определяется выражением

$$\frac{dc}{dt} = -kc^2.$$

В этом случае для зоны идеального смешения имеем

$$V_{\text{см}} k (c')^2 = G(c^{\text{BX}} - c'),$$

откуда

$$c' = \frac{\sqrt{1 + 4\bar{t}_{\text{см}} k c^{\text{BX}}} - 1}{2\bar{t}_{\text{см}} k}.$$

Изменение концентрации в зоне идеального вытеснения определяется уравнением

$$v \frac{dc}{dl} = -kc^2,$$

интегрирование которого дает

$$\frac{1}{c} = \frac{1}{c'} + k\bar{t}_{\text{выт}}.$$

Таким образом концентрация вещества *A* на выходе комбинированной системы (рис. 3.8, *а*) составит:

$$c = \frac{2\bar{t}_{\text{см}} k}{\sqrt{1 + 4\bar{t}_{\text{см}} k c^{\text{BX}}} + 2k^2 \bar{t}_{\text{см}} \bar{t}_{\text{выт}} - 1}}. \quad (3.24)$$

Для системы, изображенной на рис. 3.8, *б*, концентрация вещества на выходе из зоны идеального вытеснения определяется уравнением

$$v \frac{dc}{dl} = -kc^2,$$

или после интегрирования

$$c' = \frac{c^{\text{BX}}}{1 + k\bar{t}_{\text{выт}}c^{\text{BX}}}.$$

В зоне идеального смешения изменение концентрации определяется следующим уравнением

$$V_{\text{см}}kc^2 = G(c'-c),$$

откуда получаем

$$c = \frac{\sqrt{1 + 4\bar{t}_{\text{см}}kc^{\text{BX}} / (1 + k\bar{t}_{\text{выт}}c^{\text{BX}}) - 1}}{2k\bar{t}_{\text{см}}c^{\text{BX}}}. \quad (3.25)$$

Нетрудно убедиться, что выражения (3.24), (3.25) для выходных концентраций комбинированных систем (рис. 3.8 а, б) дают различные значения. Следовательно, для осуществления химических реакций с нелинейной кинетикой порядок комбинирования моделей идеального смешения и вытеснения оказывает влияние на протекание процесса взаимодействия.

## 3.2 Математическое описание процессов теплообмена

### в технологических аппаратах

Теплообменом называется любой процесс переноса теплоты, в котором она в соответствии со вторым началом термодинамики самопроизвольно переходит от более нагретой среды к менее нагретой. Движущей силой процесса переноса теплоты является разность температур.

Перенос теплоты возможен тремя различными способами: теплопроводностью, конвекцией и излучением.

*Теплопроводностью* называется перенос теплоты при непосредственном соприкосновении тел (или частей одного тела) с различными температурами. Этот процесс можно представить себе как распространение теплоты от частицы к частице при отсутствии их перемещения. В чистом виде теплопроводность наблюдается в твердых телах, а в капельных жидкостях и газах – лишь при отсутствии в них конвективных токов.

*Конвективный* перенос теплоты, возможный только в жидкостях и газах, совершается в результате перемещения их частиц в объеме. В зависимости от причины, вызывающей перемещение частиц жидкости или газа, различают конвективный теплообмен при *свободной* конвекции и при *вынужденной* конвекции. Свободная конвекция предполагает перемещение частиц, вызванное исключительно разностью плотностей жидкости или газа в различных частях занимаемого ими объема вследствие различия температур. Конвекция называется вынужденной, когда перемещение частиц жидкости или газа происходит под действием внешних сил (нагнетание насосами, компрессорами и т.п.).

*Лучистым* теплообменом называется процесс переноса теплоты в виде электромагнитных волн, сопровождающихся превращением тепловой энергии в лучистую и обратно лучистой в тепловую.

В технике рассмотренные способы теплообмена редко встречаются в обособленном виде: чаще всего приходится иметь дело с сочетанием двух или даже всех трех способов при их последовательном или одновременном действии. Особое место занимает теплообмен, сопровождающийся изменением агрегатного состояния тел, участвующих в этом процессе (испарение жидкости, конденсация паров). Различают два случая теплообмена: теплоотдачу и теплопередачу. Теплоотдачей называется процесс те-



плообмена между твердым телом (например, стенкой аппарата) и соприкасающейся с ней жидкостью или газом. Теплообмен между жидкостями, газами, жидкостью и газом, разделенными стенкой называется теплопередачей.

Количество тепла, проходящее через данную поверхность за время  $\tau$  будем называть тепловым потоком и обозначать через  $Q$  [Дж]. Тепловой поток, проходящий в единицу времени через  $1 \text{ м}^2$  поверхности назовем удельным тепловым потоком, или плотностью теплового потока и обозначим через  $q$   $\left[ \frac{\text{Дж}}{\text{м}^2 \text{с}} = \frac{\text{Вт}}{\text{с}} \right]$ .

Сформулируем физические закономерности, определяющие процессы, связанные с распространением тепла.

1 **Закон Фурье:** количество тепла  $dQ$  [Дж], переданного посредством теплопроводности через площадь сечением  $S$  изотермической поверхностью тела за время  $d\tau$  выражается основным уравнением теплопроводности

$$dQ = -\lambda S \frac{dT}{dn} d\tau .$$

Отрицательный знак в правой части уравнения является следствием падения температуры в направлении переноса теплоты. Коэффициент пропорциональности  $\lambda$  в уравнении называется коэффициентом теплопроводности,  $\lambda$ . Он выражается количеством теплоты, переданного за 1 с через  $1 \text{ м}^2$  поверхности тела при градиенте температуры в  $1 \text{ }^\circ\text{C}$  на 1 м длины нормали к изотермической поверхности. Величина  $\lambda$  зависит от природы вещества, являясь его индивидуальным свойством. Численные значения  $\lambda$  определяются опытным путем. Величина  $\lambda$  для различных веществ сильно различается, а для одного и того же вещества зависит от температуры, плотности, структуры, влажности и других факторов.

2 **Уравнение Ньютона:** тепловой поток  $\frac{dQ}{d\tau}$  при конвективном теплообмене пропорционален разности температур  $(\theta - T)$  поверхности  $S$  твердого тела и соприкасающейся с ним среды.

Процессы теплообмена осуществляют в теплообменных аппаратах (теплообменниках). Теплообменником называется устройство для передачи теплоты от одних сред (горячих теплоносителей) к другим (холодным) теплоносителям. В химической и пищевой технологиях теплообменники применяются для нагревания и охлаждения веществ в различных агрегатных состояниях, испарения жидкостей и конденсации паров, перегонки и сублимации, абсорбции и адсорбции, отвода и подвода тепла при проведении экзо- и эндотермических реакций. Соответственно своему назначению теплообменные аппараты называют подогревателями, холодильниками, испарителями, конденсаторами, дистилляторами, сублиматорами, плавителями и т.п.

По способу передачи теплоты различают теплообменники поверхностные и смешительные. В первом случае передача тепла происходит через разделяющие твердые стенки, во втором – непосредственным контактом (смешением) нагретых и холодных сред (жидкостей, газов, твердых веществ). Поверхностные аппараты подразделяются на рекуперативные и регенеративные. В рекуперативных аппаратах теплота от горячих теплоносителей к холодным передается через разделяющую их стенку, поверхность которой называется теплообменной поверхностью, или поверхностью нагрева. В регенеративных аппаратах оба теплоносителя попеременно соприкасаются с одной и той же стенкой, нагревающейся (аккумулируя тепло) при прохождении горячего потока и охлаждающейся (отдавая аккумулированное тепло) при последующем прохождении холодного потока.

Различают следующие виды расчетов теплообменных процессов, осуществляемые в тех или иных теплообменниках.

*Проектный* расчет проводят с целью определения площади необходимой теплообменной поверхности, а в случае многосекционных теплообменных аппаратов – числа их секций, схемы соединения секций или аппаратов между собой. Кроме того, при проектировании детализируют конструкцию теплообменника, компонуюемую, как правило, из стандартизованных деталей, узлов, секций, аппаратов. Также

рассчитывают массовые, габаритные, гидравлические и другие показатели технико-экономической эффективности.

*Проектно-конструкторский* расчет в отличие от проектного ориентирован на нестандартные теплообменные аппараты. Он выполняется на базе определенной технологической программы машиностроительного завода и разработанных каталогов основных деталей. Проектно-конструкторский расчет включает проектный, компоновочный и прочностной расчеты.

*Поверочный* расчет необходим для определения неизвестных переменных состояния теплоносителей (расход, давление, температура) при заданных конструкции и схеме потоков теплоносителей.

*Термодинамический* расчет проводят с целью выявления термодинамической эффективности процесса переноса теплоты, определения потерь эксергии, эксергитического КПД и т.д.

*Исследовательский* расчет выполняют на основе проектного и поверочного расчетов для оптимизации термодинамических, энергетических, конструктивных или технико-экономических показателей теплообменников, а также с целью корректировки уравнений математических моделей по экспериментальным данным, выявление влияния различных физических величин или условий эксплуатации на показатели эффективности теплообменных аппаратов, условий переноса теплоты и т.д.

Рассмотрим вывод уравнения математической модели процесса нагрева потока жидкости конденсирующимся паром, осуществляемого в рекуперативном теплообменнике (рис. 3.9). Предположим, что нагреваемый поток жидкости подается в трубное (реакционное) пространство, пар – в межтрубное пространство (змеевик или теплообменную рубашку). Движение потока жидкости соответствует определенной типовой модели гидродинамики: идеальное вытеснение, идеальное смешение, диффузионный режим и т.п.

1 Гидродинамика нагреваемого потока соответствует модели идеального смешения, а пар подается в змеевик, находящийся внутри реакционного пространства аппарата (рис. 3.10). При сделанных допущениях температура жидкости в каждой точке реакционного пространства теплообменника и на его выходе одинакова, а пар конденсируется при температуре  $t_k$ . Составим уравнение теплового баланса по потоку нагреваемой жидкости за промежуток времени  $(\tau_1, \tau_2)$ :

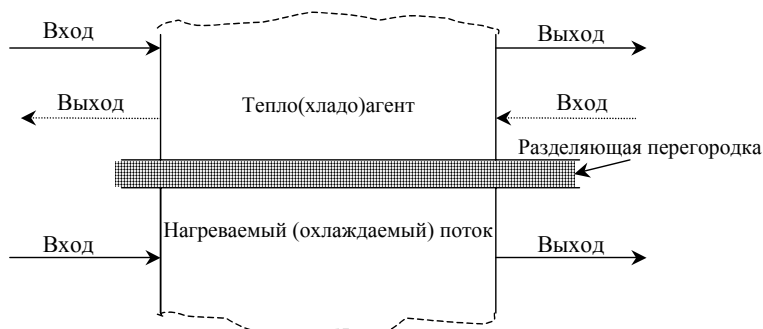


Рис. 3.9 К выводу уравнений математической модели

процесса теплообмена через разделяющую перегородку

$$c_p \rho G \int_{\tau_1}^{\tau_2} [T(\tau) - T^{Bx}(\tau)] d\tau + \int_{\tau_1}^{\tau_2} k_T S [T(\tau) - t_k] d\tau = c_p \rho V [T(\tau_2) - T(\tau_1)],$$

где  $c_p$ ,  $\rho$ ,  $G$  – теплоемкость, плотность и расход потока жидкости соответственно;  $S$  – поверхность теплообмена;  $V$  – объем реакционной зоны теплообменника;  $k_T$  – коэффициент теплопередачи.

Пользуясь теоремой о среднем, получим равенство

$$c_p \rho G [T(\tau) - T^{Bx}(\tau)] \Big|_{\tau=\tau_3} \Delta\tau + k_T S [T(\tau) - t_k(\tau)] \Big|_{\tau=\tau_4} \Delta\tau = c_p \rho V [T(\tau_2) - T(\tau_1)]$$

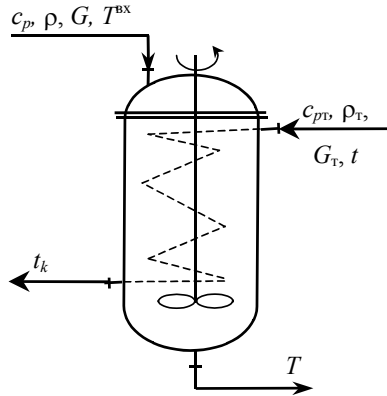
которое при помощи теоремы о конечных приращениях можно преобразовать к виду

$$c_p \rho G [T(\tau_3) - T_{\text{вх}}(\tau_3)]_{\tau_3 \in [\tau_1, \tau_2]} \Delta\tau + k_{\tau} S [T(\tau_4) - t_k]_{\tau_4 \in [\tau_1, \tau_2]} \Delta\tau = \\ = c_p \rho V \frac{dT}{d\tau} \Big|_{\tau=\tau_5 \in [\tau_1, \tau_2]},$$

где  $\tau_3, \tau_4, \tau_5$  – промежуточные точки интервала  $(\tau_1, \tau_2)$ .

Отсюда после сокращения на  $\Delta\tau$  находим

$$c_p \rho G [T(\tau) - T^{\text{вх}}(\tau)]_{\tau=\tau_3} + k_{\tau} S [T(\tau_4) - t_k]_{\tau=\tau_4} = c_p \rho V \frac{dT}{d\tau} \Big|_{\tau=\tau_5}.$$



**Рис. 3.10 К выводу уравнений математического описания**

Наши рассуждения относятся к произвольному промежутку времени  $(\tau_1, \tau_2)$ . Переходя к пределу при  $(\tau_1, \tau_2) \rightarrow \tau$  получим уравнение динамики процесса теплообмена

$$c_p \rho G [T(\tau) - T^{\text{вх}}(\tau)] + k_{\tau} S [T(\tau) - t_k] = c_p \rho V \frac{dT}{d\tau},$$

из которого можно получить уравнение (модель) статики процесса при  $\frac{dT}{d\tau} = 0$ ;

$$c_p \rho G [T - T^{\text{вх}}] + k_{\tau} S [T - t_k] = 0 \quad \text{или} \quad T = \frac{(c_p \rho G T^{\text{вх}} + k_{\tau} S t_k)}{c_p \rho G + k_{\tau} S}.$$

2 Гидродинамика нагреваемого потока жидкости соответствуем модели идеального вытеснения. В этом случае теплообмен осуществляется в аппарате типа «труба в трубе», причем пар подается в межтрубное пространство. Составим уравнение теплового баланса на участке трубы  $(l_1, l_2)$  за промежутков времени  $(\tau_1, \tau_2)$ :

$$c_p \rho G \int_{\tau_1}^{\tau_2} [T(l_2, \tau) - T(l_1, \tau)] d\tau + \int_{\tau_1}^{\tau_2} \int_{l_1}^{l_2} k_{\tau} \pi d [T(l, \tau) - t_k] dl d\tau = c_p \rho S \int_{l_1}^{l_2} [T(l, \tau_2) - T(l, \tau_1)] dl,$$

где  $d$  – внутренний диаметр трубы,  $S$  – площадь поперечного сечения.

Пользуясь теоремой о среднем, получим равенство, которое при помощи теоремы о конечных приращениях преобразуем к виду

$$c_p \rho G [T(l_2, \tau) - T(l_1, \tau)]_{\tau_3 \in [\tau_1, \tau_2]} \Delta\tau + k_{\tau} \pi d [T(l_4, \tau) - t_k]_{l_4 \in [l_1, l_2], \tau_4 \in [\tau_1, \tau_2]} \Delta l \Delta\tau = \\ = c_p \rho S [T(l, \tau_2) - T(l, \tau_1)]_{l_4 \in [l_1, l_2], \tau_4 \in [\tau_1, \tau_2]} \Delta l,$$

которое при помощи теоремы о конечных приращениях можно преобразовать к виду

$$c_p \rho G \frac{\partial T(l, \tau)}{\partial l} \Bigg|_{\substack{l=l_5 \in [l_1, l_2] \\ \tau=\tau_3 \in [\tau_1, \tau_2]}}^{\Delta l \Delta \tau + k_r \pi d [T(l_4, \tau) - t_k] \Delta l \Delta \tau} = c_p \rho S \frac{\partial T(l, \tau)}{\partial \tau} \Bigg|_{\substack{l=l_4 \in [l_1, l_2] \\ \tau=\tau_4 \in [\tau_1, \tau_2]}}^{\Delta l \Delta \tau},$$

где  $\tau_3, \tau_4, \tau_5$  и  $l_3, l_4, l_5$  – промежуточные точки интервалов  $(\tau_1, \tau_2)$  и  $(l_1, l_2)$ .

Отсюда после сокращения на произведение  $\Delta l \Delta \tau$  находим:

$$c_p \rho G \frac{\partial T(l, \tau)}{\partial l} \Bigg|_{\substack{l=l_5 \\ \tau=\tau_3}} + k_r \pi d [T(l, \tau) - t_k] \Bigg|_{\substack{l=l_4 \\ \tau=\tau_4}} = c_p \rho S \frac{\partial T}{\partial \tau} \Bigg|_{\substack{l=l_4 \\ \tau=\tau_4}},$$

Наши рассуждения относятся к произвольному промежутку  $(l_1, l_2)$  и  $(\tau_1, \tau_2)$ . Переходя к пределу при  $(l_1, l_2) \rightarrow l$  и  $(\tau_1, \tau_2) \rightarrow \tau$  получим уравнение динамики процесса теплообмена в аппарате типа «труба в трубе»:

$$c_p \rho G \frac{\partial T}{\partial l} + k_r S [T(l, \tau) - t_k] = c_p \rho S \frac{\partial T}{\partial \tau},$$

из которого можно получить уравнение статики при  $\frac{dT}{d\tau} = 0$ :

$$v \frac{dT}{dl} = \frac{k_r \pi d}{G \rho S} [t_k - T(l)]; \quad T(0) = T^{BX},$$

где  $v$  – скорость движения потока жидкости.

3 Гидродинамика нагреваемого потока жидкости соответствует диффузионной модели. Уравнение диффузионной модели теплообмена можно получить при подсчете баланса теплоты на отрезке  $(l_1, l_2)$ , за некоторый промежуток времени  $(\tau_1, \tau_2)$ :

$$c_p \rho G \int_{\tau_1}^{\tau_2} [T(l_2, \tau) - T(l_1, \tau)] d\tau + c_p \rho S \int_{\tau_1}^{\tau_2} \left[ D_\tau \frac{\partial T}{\partial l}(l_2, \tau) - D_\tau \frac{\partial T}{\partial l}(l_1, \tau) \right] d\tau + \\ + \int_{\tau_1}^{\tau_2} \int_{l_1}^{l_2} k_r \pi d [T(l, \tau) - t_k] dl d\tau = c_p \rho S \int_{l_1}^{l_2} \left[ D_\tau \frac{\partial T}{\partial l}(l, \tau_2) - D_\tau \frac{\partial T}{\partial l}(l, \tau_1) \right] dl.$$

Используя аналитические выкладки, аналогичные выше приведенным, можно получить уравнение диффузионной модели динамики теплообмена:

$$c_p \rho G \frac{\partial T}{\partial l} + c_p \rho S \frac{\partial}{\partial l} \left( D_\tau \frac{\partial T}{\partial l} \right) + k_r \pi d (T - t_k) = c_p \rho S \frac{\partial T}{\partial \tau},$$

из которого легко получить уравнение (модель) статики при  $\frac{dT}{d\tau} = 0$ :

$$v \frac{\partial T}{\partial l} + \frac{\partial}{\partial l} \left( D_\tau \frac{\partial T}{\partial l} \right) + \frac{k_r \pi d}{c_p \rho S} (T - t_k) = 0, \quad T(0) = T^{BX}, \quad \frac{dT}{dl}(L) = 0.$$

4 Гидродинамика нагреваемого потока жидкости в аппарате соответствует ячеечной модели. В этом случае поток жидкости, например, в аппарате с мешалкой представляется разделенным на  $m$  последовательно соединенных ячеек идеального смешения (рис. 3.5). Тогда для каждой ячейки и в целом для аппарата можно записать:

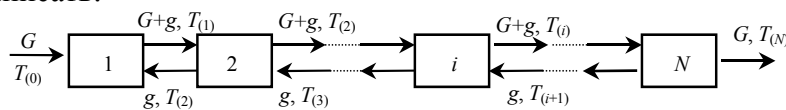


Рис. 3.11 К выводу уравнений математической модели

## процесса теплообмена

$$c_p \rho G (T_{(1)}(\tau) - T_{(1)}^{\text{BX}}) + k_r S_{(1)} (T_{(1)}(\tau) - t_k) = c_p \rho V_{(1)} \frac{dT_{(1)}}{d\tau};$$

$$c_p \rho G (T_{(2)}(\tau) - T_{(1)}) + k_r S_2 (T_{(2)}(\tau) - t_k) = c_p \rho V_{(2)} \frac{dT_{(2)}}{d\tau};$$

.....

$$c_p \rho G (T_{(m)}(\tau) - T_{(m-1)}) + k_r S_{(m)} (T_{(m)}(\tau) - t_k) = c_p \rho V_{(m)} \frac{dT_{(m)}}{d\tau}.$$

Если режим движения потока жидкости в аппарате описывается ячеечной моделью с обратными потоками (рис. 3.11), то математическая модель процесса теплообмена принимает вид:

$$c_p \rho [GT_{(1)}^{\text{BX}}(\tau) + gT_{(2)}(\tau) - (G - g)T_{(1)}(\tau)] \pm k_r S_{(1)} (T_{(1)}(\tau) - t_k) = c_p \rho V_{(1)} \frac{dT_{(1)}}{d\tau};$$

$$c_p \rho [(G + g)(T_{(1)} - T_{(2)}) + g(T_{(3)} - T_{(2)})] + k_r S_{(2)} (T_{(2)}(\tau) - t_k) = c_p \rho V_{(2)} \frac{dT_{(2)}}{d\tau};$$

.....

$$c_p \rho [(G + g)(T_{(i-1)} - T_{(i)}) + g(T_{(i+1)} - T_{(i)})] + k_r S_{(i)} (T_{(i)}(\tau) - t_k) = c_p \rho V_{(i)} \frac{dT_{(i)}}{d\tau};$$

$$c_p \rho [(G + g)T_{(N-1)} - (G + g)T_{(N)}] + k_r S_{(N)} (T_{(N)}(\tau) - t_k) = c_p \rho V_{(N)} \frac{dT_{(N)}}{d\tau}.$$

Зададим начальные условия для записанных выше уравнений динамики процесса теплообмена

$$T_{(1)}(0) = T_{10}, \quad T_{(i)}(0) = T_{i0}, \quad T_{(N)}(0) = T_{N0}.$$

### Для получения уравнений модели статики процесса теплообмена необходимо

$$\frac{dT_{(i)}}{d\tau} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N;$$

$$c_p \rho [GT_{(1)}^{\text{BX}} + gT_{(2)} - (G + g)T_{(1)}] + k_r S_{(1)} (T_{(1)} - t_k) = 0,$$

$$c_p \rho [(G + g)(T_{(1)} - T_{(2)}) + g(T_{(3)} - T_{(2)})] + k_r S_{(2)} (T_{(2)} - t_k) = 0,$$

.....

$$c_p \rho [(G + g)(T_{(i-1)} - T_{(i)}) + g(T_{(i+1)} - T_{(i)})] + k_r S_{(i)} (T_{(i)} - t_k) = 0,$$

.....

$$c_p \rho [(G + g)T_{(N-1)} - (G + g)T_{(N)}] + k_r S_{(N)} (T_{(N)} - t_k) = 0.$$

*Пример.* Оценим профиль температуры нагреваемого потока жидкости, исходя из различных гидродинамических моделей движения этого потока. Зададим условия осуществления теплообмена:

$$G = 1000 \text{ кг/ч}; \quad c_p = 2520 \text{ Дж/(кгК)}; \quad \rho = 1200 \text{ кг/м}^3.$$

Обогрев осуществляется насыщенным водяным паром, имеющим температуру  $t = 120^\circ\text{C}$ . Диаметр цилиндрической поверхности теплообмена равен  $d = 0,5 \text{ м}$ . Коэффициент теплопередачи составляет  $k_T = 600 \text{ Вт/м}^2\text{К}$ , длина теплообменника –  $1,5 \text{ м}$ , параметры ячеечной и диффузионной модели:  $n = 3$ ,  $D_T = 3,54 \cdot 10^{-4} \text{ м}^2/\text{с}$ , на рис. Приведены результаты расчета температурного профиля по длине теплообменника.

Они

температур

Более

температуры

ячеечная и

конечные

практически

температур

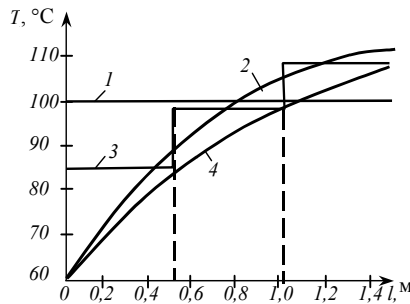


Рис. 3.12 Расчет температурного профиля по различным моделям:  
1 – идеальное смешение; 2 – идеальное вытеснение;  
3 – ячеечная модель; 4 – диффузионная модель

свидетельствуют о значительном разбросе

для различных моделей гидродинамики.

реальный характер изменения

по длине теплообменника отражают

диффузионная модели. При этом

температуры для данных моделей

совпадают, но, тем не менее, профили

различаются существенно.

Приведенный пример подчеркивает важность учета реальной структуры потоков в аппарате и его адекватного описания гидродинамическими моделями.

### Вывод уравнения теплопроводности.

Для простоты будем рассматривать одномерные процессы теплопроводности. Они имеют место, например, в длинном тонком металлическом стержне, нагреваемом с одного из торцов при условии, что стержень изотропен. Его начальная температура в любом поперечном сечении не зависит от  $y, z$  (это условие должно выполняться и на торцах стержня), а потерями тепла с боковой поверхности можно пренебречь.

Рассмотрим произвольное сечение стержня с координатой  $x$ . Пусть  $\rho(x), c_p(x), k(x)$  – соответственно плотность, удельная теплоемкость и коэффициент теплопроводности в точках этого сечения. Запишем уравнение распространения этого тепла в стержне (уравнение теплопроводности) на некотором отрезке  $(x_1, x_2)$  за некоторый промежуток времени  $(t_1, t_2)$ , применяя закон сохранения энергии (в интегральной форме)

$$\int_{t_1}^{t_2} \left[ k \frac{\partial T}{\partial x}(x, \tau) \Big|_{x=x_2} - k \frac{\partial T}{\partial x}(x, \tau) \Big|_{x=x_1} \right] d\tau + \int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} F(\xi, \tau) d\xi d\tau = \int_{x_1}^{x_2} c_p \rho [T(\xi, t_2) - T(\xi, t_1)] d\xi$$

Предположим, что функция  $T(x, t)$  имеет непрерывные производные  $T_{xx}$  и  $T_t$ .

Пользуясь теоремой о среднем, получаем равенство

$$\left[ k \frac{\partial T}{\partial x}(x, \tau) \Big|_{x=x_2} - k \frac{\partial T}{\partial x}(x, \tau) \Big|_{x=x_1} \right]_{\tau=t_3} \Delta t + F(x_4, t_4) \Delta x \Delta t = \\ = \left\{ c_p \rho [T(\xi, t_2) - T(\xi, t_1)] \right\}_{\xi=\xi_3} \Delta x,$$

которое при помощи теоремы о конечных приращениях можно преобразовать к виду:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ k \frac{\partial T}{\partial x}(x, \tau) \right]_{x=x_5} \Delta x \Delta t + F(x_4, t_4) \Delta x \Delta t = \left[ c_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} \right]_{x=x_3} \Delta x \Delta t,$$

где  $t_3, t_4, t_5$  и  $x_3, x_4, x_5$  – промежуточные точки интервалов  $(x_1, x_2)$  и  $(t_1, t_2)$ .

$$\frac{dQ}{d\tau} = \alpha(\theta - T)S,$$

где  $\theta, T$  – температура поверхности твердого тела и потока, соответственно;  $\alpha$  – коэффициент теплоотдачи,  $\left[ \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \text{град}} \right]$ .

Коэффициент теплоотдачи  $\alpha$  выражает количество тепла, отданного единицей поверхности ( $S = 1 \text{ м}^2$ ) в единицу времени ( $\tau = 1 \text{ с}$ ) при разности температур  $(\theta - T)$ . Заметим, что  $\alpha$  не является постоянной величиной, а зависит от многих параметров.

3 Количество теплоты, которое необходимо сообщить однородному телу, чтобы повысить его температуру на величину  $\Delta T$  равно

$$Q = c_p m \Delta T = c_p \rho V \Delta T,$$

где  $c_p$  – удельная теплоемкость,  $\left[ \frac{\text{Дж}}{\text{кг} \cdot \text{К}} \right]$ ;  $m$  – масса тела, кг;  $\rho$  – плотность тела,  $\text{кг}/\text{м}^3$ ;  $V$  – объем тела,  $\text{м}^3$ .

4 Внутри потока может возникать или поглощаться теплота. Выделение теплоты может быть описано плотностью тепловых потоков  $F(x, y, z, \tau)$  в точке  $(x, y, z)$  в момент времени  $\tau$ . В результате действия этих источников за промежуток времени  $(\tau, \tau + \Delta \tau)$  выделится количество теплоты

$$dQ = F(x, y, z, \tau) dx dy dz d\tau,$$

или в интегральной форме:

$$Q = \int_{\tau_1}^{\tau_2} \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} \int_{z_1}^{z_2} F(x, y, z, \tau) dx dy dz d\tau.$$

Отсюда после сокращения на произведение  $\Delta x \cdot \Delta t$  получим:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) \Big|_{x=x_5} + F(x, t) \Big|_{t=t_4} = c_p \rho \frac{\partial T}{\partial t} \Big|_{x=x_3}.$$

Все эти рассуждения относятся к произвольным промежуткам  $(x_1, x_2)$  и  $(t_1, t_2)$ . Переходя к пределу при  $x_1, x_2 \rightarrow x$  и  $t_1, t_2 \rightarrow t$ , получим уравнение

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + F(x, t) = c_p \rho \frac{\partial T}{\partial t},$$

называемое уравнением теплопроводности.

### Частные случаи.

1. Если стержень однороден, то  $\rho, c_p, k = \text{const}$ , и мы получаем линейное уравнение теплопроводности

$$T_t = a^2 T_{xx} + f(x, t),$$

где  $a^2 = \frac{k}{c_p \rho}$  – коэффициент температуропроводности;  $f(x, t) = \frac{F(x, t)}{c_p \rho}$ .

Если источники отсутствуют, т.е.  $F(x, t) = 0$ , то уравнение теплопроводности примет вид

$$T_t = a^2 T_{xx}.$$

2. В случае теплообмена с окружающей средой, подчиняющегося закону Ньютона, количество тепла, теряемого стержнем, рассчитываемого на единицу длины и времени, равно  $F_0 = \alpha(T - \theta)$ , где  $\theta(x, t)$  – температура окружающей среды,  $\alpha$  – коэффициент теплообмена.

Поскольку в нашем приближении не учитывается распределение температуры по сечению, то действие поверхностных источников эквивалентно действию объемных источников тепла. Таким образом, плотность тепловых источников в точке  $x$  в момент времени  $t$  равна  $F = F_1(x, t) - \alpha(T - \theta)$ , где  $F_1(x, t)$  – плотность других источников тепла.

Если стержень однороден, то уравнение теплопроводности с боковым теплообменом имеет следующий вид:  $T_t = a^2 T_{xx} - h_1 T + f(x, t)$ , где  $h_1 = \frac{\alpha}{c_p \rho}$ ;  $f(x, t) = h_1 \theta(x, t) + \frac{F_1(x, t)}{c_p \rho}$  – известная функция.

3. Коэффициенты  $c_p$  и  $k$ , как правило, являются медленно меняющимися функциями температуры. Поэтому сделанное выше предположение о постоянстве этих коэффициентов возможно лишь при условии рассмотрения небольших интервалов изменения температуры.

Изучение процесса теплопроводности в большом интервале изменения температур приводит к нелинейному уравнению теплопроводности, которое для неоднородной среды запишется в виде

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( k(T, x) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + F(x, t) = c_p(T, x) \rho(T, x) \frac{\partial T}{\partial t}.$$

Для получения единственного решения уравнения теплопроводности необходимо к уравнению присоединить начальные и граничные условия.

Начальное условие состоит в задании значений функции  $T(x, t)$  в начальный момент  $t_0$ , т.е.  $T(x, t_0) = T_0(x)$ ,  $0 \leq x \leq l$ .

Граничные условия могут быть различными в зависимости от температурного режима на торцах стержня. Рассматривают три основных типа граничных условий.

1 На торцах стержня в любой момент времени задается температура:

$$T(0, t) = T_1(t), \quad T(l, t) = T_2(t), \quad t > 0.$$

2 На торцах стержня задаются потоки теплоты как функции времени:

$$\frac{\partial T}{\partial x}(0, t) = v_1(t), \quad \frac{\partial T}{\partial x}(l, t) = v_2(t).$$

К этим условиям мы приходим, если задана величина теплового потока  $Q(l, t)$ , протекающего через торцевое сечение стержня,

$$Q(l, t) = -k \frac{\partial T}{\partial x}(l, t),$$

откуда  $\frac{\partial T}{\partial x}(l, t) = v(t)$ , где  $v(t)$  – известная функция, выражающаяся через заданный поток  $Q(l, t)$  по формуле



$$v(t) = -\frac{Q(l, t)}{k}.$$

**3** На торцах стержня задаются линейные соотношения между производной и функцией, например, для  $x = l$ :

$$\frac{\partial T}{\partial x}(l, t) = -h_2 [T(l, t) - \theta(t)].$$

Это граничное условие соответствует теплообмену по закону Ньютона на поверхности тела с окружающей средой, температура которой  $\theta$  известна.

Пользуясь двумя выражениями для теплового потока, вытекающего через сечение  $x = l$ :  $Q = \alpha(T - \theta)$  и  $Q = -k \frac{\partial T}{\partial x}$  получаем математическую формулировку третьего граничного условия в виде

$$\frac{\partial T}{\partial x}(l, t) = -h_2 [T(l, t) - \theta(t)],$$

где  $h_2 = \alpha / k$  – коэффициент теплообмена;  $\theta(t)$  – некоторая заданная функция.

Возможны также и иные виды краевых условий, соответствующие иным физическим ситуациям. Разумеется, допустимы различные комбинации условий, например, на левом конце стержня известна температура, а на правом – поток тепла и т.д.

Более сложный (нелинейный) вариант условий на торцах отвечает сильно нагретому и поэтому излучающему энергию стержню, не контактирующему с какими-либо телами. Тогда в единицу времени стержень теряет на своих границах (торцах) энергию, равную  $\sigma T^4(0, t)$  и  $\sigma T^4(l, t)$  соответственно. В результате получаются условия:

$$\sigma T^4(0, t) = -k(T) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0}, \quad \sigma T^4(l, t) = -k(T) \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=l}, \quad t > 0.$$

### *Моделирование процесса диффузии газа в полый трубке.*

Если среда неравномерно заполнена газом, то имеет место диффузия его из мест с более высокой концентрацией в места с меньшей концентрацией. Это же явление имеет место и в растворах, если концентрация растворенного вещества в объеме не постоянна.

Рассмотрим процесс диффузии в полый трубке или в трубке, заполненной пористой средой, предполагая, что во всякий момент времени концентрация газа (раствора) по сечению трубки одинакова. Тогда процесс диффузии может быть описан функцией  $c(x, t)$ , представляющей концентрацию в сечении  $x$  в момент времени  $t$ .

Согласно закону Нернста, масса газа, протекающая через сечение  $x$  за промежуток времени  $(t, t + \Delta t)$ , равна

$$dG = -D \frac{\partial c}{\partial x}(x, t) S dt = W S dt;$$

$$W = -D \frac{\partial c}{\partial x},$$

где  $D$  – коэффициент диффузии;  $S$  – площадь сечения трубки;  $W(x, t)$  – плотность диффузионного потока, равная массе газа, протекающего в единицу времени через единицу площадки.

По определению концентрации, количество газа в объеме  $V$  равно,

$$G = cV.$$

Отсюда получаем, что изменение массы газа на участке трубки  $(x_1, x_2)$  при изменении концентрации на  $\Delta C$  равно

$$\Delta G = \int_{x_1}^{x_2} \varepsilon(x) \Delta c S dx,$$

где  $\varepsilon(x)$  – коэффициент пористости.

При выводе уравнения диффузии будем считать, что в трубке нет источников вещества, и диффузия через стенки трубки отсутствует.

Составим уравнение баланса массы газа на участке  $(x_1, x_2)$  за промежуток времени  $(t_1, t_2)$ :

$$S \int_{t_1}^{t_2} \left[ D(x_2) \frac{\partial u}{\partial x}(x_2, \tau) - D(x_1) \frac{\partial u}{\partial x}(x_1, \tau) \right] d\tau = S \int_{x_1}^{x_2} \varepsilon(\xi) [u(\xi, t_2) - u(\xi, t_1)] d\xi.$$

Отсюда, подобно выводу уравнения теплопроводности, получим уравнение

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial c}{\partial x} \right) = \varepsilon \frac{\partial c}{\partial t},$$

являющееся уравнением диффузии. Оно вполне аналогично уравнению теплопроводности.

Если коэффициент диффузии постоянен  $D = \text{const}$ , то уравнение диффузии принимает вид  $c_t = a^2 c_{xx}$ , где  $a^2 = D/\varepsilon$ .

Если коэффициент пористости  $\varepsilon = 1$ , а коэффициент диффузии постоянен, то уравнение диффузии имеет вид  $c_t = D c_{xx}$ .

Для получения единственного решения уравнения диффузии необходимо к уравнению присоединить начальные и граничные условия.

Как бы глубоки и разнообразны ни были методы качественного анализа математических моделей, область их применимости всегда ограничена. Это – либо простые, главным образом, линейные, либо отдельные фрагменты сложных, в том числе нелинейных моделей. Единственным универсальным способом исследования моделей является применение численных методов для нахождения приближенного решения поставленной задачи. Для решения нелинейных задач теплопроводности и диффузии широко применяется метод конечных разностей [12], который состоит из двух этапов: на первом строятся дискретные аналоги исходных моделей и изучаются их свойства, на втором дискретные уравнения (как правило, нелинейные алгебраические уравнения высокой размерности) решаются численно.

*О переходе к дискретным моделям теплопроводности и диффузии.*

Метод конечных разностей состоит в следующем. Область непрерывного изменения аргументов  $(x$  и  $t)$  заменяется конечным (дискретным) множеством точек (узлов), называемым сеткой. Вместо функции непрерывного аргумента рассматриваются функции дискретного аргумента, определенные в узлах сетки и называемые сеточными функциями. Производные, входящие в дифференциальные уравнения, заменяются (аппроксимируются) при помощи соответствующих разностных соотношений. В результате такой замены дифференциальное уравнение заменяется системой алгебраических (разностных) уравнений. Начальные и краевые условия то же заменяются разностными начальными и краевыми условиями. Естественно требовать, чтобы полученная таким образом разностная краевая задача была разрешима, и ее решение при увеличении числа  $N$  узлов сетки приближалось (сходилось) к решению исходной задачи.

Пусть область изменения аргументов  $(x, t)$  есть прямоугольник  $\Pi = (0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq T)$ . Построим на отрезке  $0 \leq x \leq 1$  сетку  $\{x_i = ih, i = 0, 1, \dots, N_1\}$  с шагом  $h = 1/N_1$  и сетку  $\{t_j = j\tau, j = 0, 1, \dots, N_2\}$  с шагом  $\tau = T/N_2$  на отрезке  $0 \leq t \leq T$ .

Множество узлов  $(x_i, t_j)$  с координатами  $x_i = ih$  и  $t_j = j\tau$  назовем сеткой в прямоугольнике  $\Pi$  и обозначим через  $\omega_{ht}$  сетку  $\{(x_i = ih, t_j = j\tau), i = \overline{0, N_1}; j = \overline{0, N_2}\}$ . Эта сетка равномерна по каждой из переменных  $x$  и  $t$ .

Пусть  $y$  – сеточная функция, заданная на  $\omega_{h\tau}$ . Будем обозначать  $y_i^j = y(x_i, t_j)$  значение сеточной функции  $y$  в узле  $(x_i, t_j)$  сетки  $\omega_{h\tau}$ . Непрерывной функции  $T(x, t)$  или  $c(x, t)$ , где  $(x, t) \in \Pi$ , будем ставить в соответствие сеточную функцию  $y_i^j = T(x_i, t_j) \vee c(x_i, t_j)$ .

Рассмотрим теперь производную  $v'_x$  функции  $v(x)$ . Заменить ее разностным выражением можно бесчисленным множеством способов. Простейшими являются замены вида  $v'_x \sim \frac{v_i - v_{i-1}}{h} = L_h^- v_i$  – левая разностная производная (левое разностное отношение);  $v'_x \sim \frac{v_{i+1} - v_i}{h} = L_h^+ v_i$  – правая разностная производная;  $v'_x \sim \frac{v_{i+1} - v_{i-1}}{2h} = L_h^0 v_i$  – центральная разностная производная, где знак  $\sim$  означает соответствие или аппроксимацию.

Обращаясь к формулам для  $L_h^\pm$ , видим, что  $L_h^- v_i$  и  $L_h^+ v_i$  аппроксимируют  $L_v = v'$  с первым порядком. Выражения для  $L_h^- v_i$  содержат значения  $v$  в двух узлах  $x = x_i$  и  $x = x_{i-1}$  сетки. Говорят, что оператор  $L_h^-$  является двухточечным или оператором первого порядка.

Множество узлов, значения сеточной функции в которых входят в выражение  $L_h v$ , называют шаблоном оператора  $L_h$  в точке  $x_i$ . Очевидно, что шаблон оператора  $L_h^-$  состоит из узлов  $x_i$  и  $x_{i-1}$ , а шаблон  $L_h^+$  – из узлов  $x_i$  и  $x_{i+1}$ .

Возьмем теперь трехточечный оператор, определенный на шаблоне  $x_{i-1}, x_i, x_{i+1}$ :

$$L_h^{(\sigma)} v_i = \sigma L_h^+ v_i + (1 - \sigma) L_h^- v_i = \frac{\sigma v_{i+1} + (1 - 2\sigma) v_i - (1 - \sigma) v_{i-1}}{h},$$

где  $\sigma$  – произвольное число. В частности при  $\sigma = 1/2$  получаем центральную разностную производную  $L_h^0 v_i$ , которая аппроксимирует  $v'(x)$  со вторым порядком.

Рассмотрим теперь вторую производную  $L\vartheta = \vartheta''$ . Выберем трехточечный шаблон, состоящий из узлов  $x_{i-1}, x_i, x_{i+1}$  и рассмотрим разностный оператор

$$L_h v_i = \frac{v_{i+1} - 2v_i + v_{i-1}}{h^2} = \frac{\frac{v_{i+1} - v_i}{h} - \frac{v_i - v_{i-1}}{h}}{h},$$

$$L_h v_i = \frac{1}{h} (L_h^+ v_i - L_h^- v_i) = \frac{\frac{v_{i+1} - v_i}{h} - \frac{v_i - v_{i-1}}{h}}{h} = \frac{v_{i+1} - 2v_i + v_{i-1}}{h^2}.$$

На практике аппроксимация производных на многоточечных шаблонах используется редко, так как при увеличении шаблона обычно увеличивается объем вычислительной работы, и ухудшаются качества получающихся разностных операторов (в смысле устойчивости).

Рассмотрим более сложный оператор  $Lu = \frac{\partial u}{\partial t} - \frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ , где  $u = u(x, t)$  – функция двух аргументов  $x$  и  $t$ , меняющаяся в области  $\Pi = (0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq T)$ . Введем сетку  $\omega_{h\tau} = \{(x_i = ih, t_j = j\tau), i = \overline{0, N_1}; j = \overline{0, N_2}\}$  с шагами  $h = 1/N_1$ ;  $\tau = T/N_2$ . Произведем замену

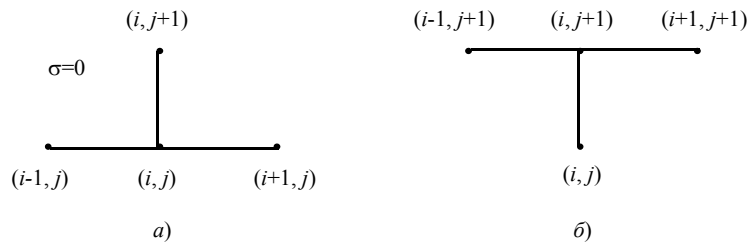
$$\frac{\partial u}{\partial t} \sim \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau} = u_{t,i}^{j+1}; \quad \text{с} \quad \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \sim \frac{u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j}{h^2} = u_{xx,i}^j.$$

В результате получим разностный оператор

$$L_{h\tau} u_i^{j+1} = \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau} - \frac{u_{i-1}^j - 2u_i^j + u_{i+1}^j}{h^2}.$$

Этот оператор определен на шаблоне, состоящем из четырех точек  $(x_i, t_{j+1})$ ,  $(x_i, t_j)$ ,  $(x_{i-1}, t_j)$ ,  $(x_{i+1}, t_j)$  (рис. 3.13, а).

Оператор  $L_{h\tau}$  определен не во всех узлах  $\omega_{h\tau}$ , а только при  $0 < i < N$  и  $j > 0$ , т.е. во внутренних узлах. В остальных узлах, называемых граничными, должны быть заданы начальные и краевые



**Рис. 3.13 Четырехточечный шаблон**

условия. Оператор  $L_{h\tau}$  имеет первый порядок аппроксимации по  $\tau$  и второй по  $h$

$$\max_{\omega_{h\tau}} |L_{h\tau} u_i^j - (Lu)_i^j| = O(h^2 + \tau).$$

Аппроксимируем этот же оператор  $Lu$  на шаблоне вида (рис. 3.13, б)  
В результате получим оператор

$$L_{h\tau} u_i^{j+1} = \frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\tau} - \frac{u_{i-1}^{j+1} - 2u_i^{j+1} + u_{i+1}^{j+1}}{h^2},$$

аппроксимирующий  $Lu$  с тем же порядком точности, что и предыдущий оператор.

Рассмотрим пример постановки разностной задачи для уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + f(x, t), \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t < t_k;$$

$$T(x, 0) = T_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1; \quad T(0, t) = \mu_1(t); \quad T(1, t) = \mu_2(t), \quad 0 \leq t \leq t_k.$$

Введем равномерную сетку  $\omega_{h\tau} = \{(x_i = ih, t_j = j\tau), i = \overline{0, N_1}; j = \overline{0, N_2}\}$  и запишем соответствующую разностную краевую задачу

$$\frac{y_i^{j+1} - y_i^j}{\tau} = \frac{y_{i-1}^j - 2y_i^j + y_{i+1}^j}{h^2} + \varphi_i^{j+1}, \quad 0 < i < N, \quad j > 0$$

$$y_i^0 = T_0(x_i); \quad y_0^j = \mu_1(t_j); \quad y_N^j = \mu_2(t_j), \quad \text{где } \varphi_i^{j+1} = f(x_i, t_j).$$

Определим  $y_i^{j+1}$ :  $y_i^{j+1} = (1 - 2\gamma)y_i^j + \gamma(y_{i-1}^j + y_{i+1}^j) + \tau\varphi_i^{j+1}$ , где  $\gamma = \tau/h^2$ .

Если  $y_i^j$  известно, то по этой формуле можно определить  $y_i^{j+1}$  во всех узлах  $i = 1, 2, \dots, N_1 - 1$  (на слое  $j + 1$ ). Так как при  $j = 0$  задано начальное условие  $y_i^0 = T_0(x_i)$ , то последняя формула позволяет определить от слоя к слою значения  $y_i^{j+1}$  во всех внутренних узлах сетки  $\omega_{h\tau}$ , используя при этом краевые условия. В этом случае полученная разностная схема называется **явной**.

Если выбрать другой шаблон, то разностная краевая задача примет вид

$$\frac{y_i^{j+1} - y_i^j}{\tau} = \frac{y_{i-1}^{j+1} - 2y_i^{j+1} + y_{i+1}^{j+1}}{h^2} + \varphi_i^{j+1}.$$

В этом случае для определения  $y_i^{j+1}$  на новом слое  $j+1$  получаем систему алгебраических уравнений

$$\gamma y_{i-1}^{j+1} - (1 + 2\gamma)y_i^{j+1} + \gamma y_{i+1}^{j+1} = -y_i^j - \tau\varphi_i^{j+1}, \quad 0 < i < N_1.$$

Такая схема называется неявной или схемой с опережением.

*Понятие об устойчивости разностных схем.*

После того, как разностная схема написана, возникает, прежде всего, вопрос о разрешимости полученной алгебраической системы уравнений. Если эта система неразрешима, то такую схему следует признать непригодной.

Пусть разностная задача разрешима. Тогда естественно требовать, чтобы при неограниченном измельчении сетки решение разностной задачи стремилось к решению исходной задачи для дифференциального уравнения (схема сходилась). В этих рассуждениях мы предполагаем, что разностная задача решается точно, и решение может быть найдено с любым числом знаков. Практически же все вычисления ведутся с конечным числом знаков, и на каждом этапе вычислений допускаются ошибки округления. Если малые ошибки округления, допускаемые на промежуточных этапах вычислительного процесса, при сгущении сетки приводят к большим искажениям решения, то такую схему называют неустойчивой. Она непригодна для практики.

Ошибки вычисления можно рассматривать как возмущения начальных данных или правой части уравнения. Отсюда следует, что от схемы надо требовать, чтобы решение разностной задачи мало менялось при малом изменении входных данных задачи (правой части краевых и начальных условий) или, иными словами, чтобы решение непрерывно зависело от входных данных при измельчении сетки. Если это требование выполняется, то такая схема называется *устойчивой*, в противном случае схема *неустойчива*.

*Разностные схемы для нелинейных уравнений теплопроводности (диффузии).*

При написании разностных уравнений естественно исходить из уравнения баланса, которые содержат интегралы от функций и ее производных

$$\int_{x_1}^{x_2} c_v [T(x, t_2) - T(x, t_1)] dx = \int_{t_1}^{t_2} [W(x_1, t) - W(x_2, t)] dt + \int_{x_1}^{x_2} \int_{t_1}^{t_2} f(x, t) dx dt,$$

где  $T(x, t)$  – температура,  $c_v$  – объемная теплоемкость,  $f(x, t)$  – плотность источников тепла;  $W(x, t) = -k(x, t) \frac{\partial T}{\partial x}(x, t)$  – тепловой поток;  $k(x, t, T)$  – коэффициент теплопроводности.

Если существуют непрерывные производные  $\frac{\partial T}{\partial t}$  и  $\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial T}{\partial x} \right)$ , то из уравнения баланса следует дифференциальное уравнение теплопроводности

$$c \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k(x, t) \frac{\partial T}{\partial x} \right) + f(x, t).$$

Естественно при написании разностных уравнений, приближенно описывающих тот или иной процесс, исходить из уравнения баланса. Пусть дана сетка ( $x_i = ih$ ,  $t_j = j\tau$ ). Для каждой элементарной ячейки (прямоугольника) этой сетки пишется уравнение баланса, которое содержит интегралы от функции и ее производных вдоль границы ячейки. Для их вычисления необходимо предположение о профиле функций. В зависимости от выбора локальной интерполяции как по  $x$ , так и по  $t$  мы получим различные схемы. Вопрос о выборе интерполяции подчинен требованиям устойчивости, точности и простоты реализации

Для примера рассмотрим стационарное уравнение теплопроводности

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( k(x, t) \frac{\partial T}{\partial x} \right) - q(x)T = -f(x, t), \quad 0 < x < 1; \quad k > 0, \quad q \geq 0,$$

где  $q(x)T$  – мощность стоков тепла (при  $q \leq 0$  – источников), пропорциональная температуре  $T(x)$ .

Выберем на отрезке  $0 \leq x \leq 1$  сетку  $\omega_h = \{x_i = ih, i = 0, N_1\}$  с шагом  $h$ . Напишем уравнение баланса тепла на отрезке  $x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2}$ ,

$$x_{i-1/2} = \frac{1}{2}(x_{i-1} + x_i) = x_{i-1} + \frac{h}{2};$$

$$W_{i-1/2} - W_{i+1/2} - \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(x)T(x)dx + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x)dx = 0.$$

Возьмем простейшую аппроксимацию  $T = \text{const} = T_i$  при  $x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2}$ :

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(x)T(x)dx \approx hd_iT_i, \quad d_i = \frac{1}{h} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(x)dx.$$

Проинтегрируем равенство  $\frac{dT}{dx} = -\frac{W}{k}$  на отрезке  $x_{i-1} \leq x \leq x_i$

$$T_{i-1} - T_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{W}{k} dx.$$

Полагая  $W = \text{const} = W_{i-1/2}$  при  $x_{i-1} \leq x \leq x_i$ , будем иметь

$$T_{i-1} - T_i = W_{i-1/2} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)}$$

или 
$$W_{i-1/2} = -a_i \frac{T_i - T_{i-1}}{h}; \quad a_i = \frac{1}{\frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)}}.$$

Отметим, что  $\int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)}$  есть тепловое сопротивление отрезка  $[x_{i-1}, x_i]$ . Заменяя интеграл по одной

из формул  $\frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)} \approx \frac{1}{k_{i-1/2}}$ ,  $\frac{1}{h} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{dx}{k(x)} \approx \frac{1}{2} \left( \frac{1}{k_{i-1}} + \frac{1}{k_i} \right)$ , получим  $a_i = k_{i-1/2}$ ,  $a_i = \frac{2k_{i-1}k_i}{k_{i-1} + k_i}$  и т.д.

В результате получим разностную схему вида:

$$\frac{1}{h} \left[ \frac{a_{i+1}(y_{i+1} - y_i)}{h} - \frac{a_i(y_i - y_{i-1})}{h} \right] - d_i y_i = -\varphi_i, \quad (3.25)$$

где

$$d_i = \frac{1}{h} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} q(x) dx, \quad \varphi_i = \frac{1}{h} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(x) dx.$$

Метод баланса, таким образом, позволяет получать схемы, коэффициенты которых во всех узлах сетки вычисляются по одним и тем же формулам как средние значения коэффициентов дифференциального уравнения в окрестности узла сетки.

Сами схемы (3.25) пишутся одинаково во всех узлах сетки и для любых  $k(x)$ ,  $q(x)$ ,  $f(x)$ . Такие схемы называются однородными. Для практических целей целесообразно находить коэффициенты схемы  $a, d, \varphi$  по более простым формулам, используя значения  $k, q, f$  в отдельных точках. Обычно используют шаблоны из одной или из двух точек, полагая, например,

$$a_i = k_{i-\frac{1}{2}}, \quad d_i = q_i, \quad \varphi_i = f_i,$$

если  $k, q, f$  непрерывны. Если  $k, q, f$  разрывны, то в этих формулах следует брать полусумму предельных значений слева и справа.

Рассмотрим одномерное параболическое уравнение в частных производных с начальными и граничными условиями, описывающее процессы теплопроводности и диффузии, и обсудим алгоритм его решения.

*Алгоритм численного решения краевой задачи теплопроводности (диффузии).*

Запишем в общем виде одномерное параболическое уравнение.

$$c(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial t} = \mu(x) \frac{\partial}{\partial x} \left( \nu(x) \lambda(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) + f(x, t, u), \quad (3.26)$$

$$u(x, t_0) = u_0(x), \quad (3.27)$$

$$r_1 \lambda(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} = z_1(u) u \Big|_{x=0} - \theta_1(t, u) \Big|_{x=0}, \quad (3.28)$$

$$r_2 \lambda(x, t, u) \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=l} = z_2(u) u \Big|_{x=l} - \theta_2(t, u) \Big|_{x=l}, \quad (3.29)$$

где  $u(x, t)$  – температура (концентрация);  $\lambda(x, t, u)$  – коэффициент теплопроводности (диффузии);  $c(x, t, u)$  – объемная теплоемкость;  $f(x, t, u)$  – плотность мощности источников вещества и тепла.

Постановка (3.26) – (3.29) допускает рассмотрение цилиндрических и сферических областей при наличии радиальной симметрии за счет выбора функций  $\mu(x)$ ,  $\nu(x)$  (например, при  $\mu(x) = 1/x$ ,  $\nu(x) = x$  – получаем цилиндрическую область, а при  $\mu(x) = 1/x^2$ ,  $\nu(x) = x^2$  – сферическую область).

Представление решения нелинейной краевой задачи (3.26) – (3.29) в аналитической форме возможно лишь в исключительных случаях. Универсальным методом приближенного решения является метод конечных разностей.

Приступим теперь к построению разностной схемы для краевой задачи (3.26) – (3.29). Пусть  $n$  и  $m$  – фиксированные натуральные числа. Введем на отрезке  $[0, l]$  и  $[0, T]$  сетки  $\sum_{nx}$  и  $\sum_{mt}$  с

узлами  $0 = x_0 < x_1 < \dots < x_n = l, 0 = \tau_0 < \tau_1 < \dots < \tau_m = T$ . Эти сетки  $\sum_{nx}^{mt} = \sum_{nx} \times \sum_{mt}$  определяют сетку в области  $\Pi$ . Положим  $h_i = x_i - x_{i-1}, i = \overline{1, n}, \tau_j = t_j - t_{j-1}, j = \overline{1, m}$ . На этой сетке функция  $u(x, t)$  аппроксимируется сеточной функцией  $y_{ij}$ , определенной в узлах сетки  $(x_i, t_j)$ .

Примем следующие обозначения:

$$c_i = c(x_i, t_{j+1}, y_i); \quad y_i = y_i^{j+1}; \quad \hat{y}_i = y_i^j;$$

$$\lambda_{i\pm 1/2} = \frac{1}{2} [\lambda(x_i, t_{j+1}, y_i) + \lambda(x_{i\pm 1}, t_{j+1}, y_{i\pm 1})];$$

$$\mu_i = \mu(x_i), \quad v\left(i \pm \frac{1}{2}\right) = v\left(\frac{x_i + x_{i\pm 1}}{2}\right); \quad \varphi_i = f(x_i, t_{j+1}, y_i).$$

Для построения неявной разностной схемы будем использовать четырехточечный шаблон. В результате получим неявную разностную схему с точностью  $O(h^2 + \tau)$ :

$$c_i \frac{y_i - \hat{y}_i}{\tau_{j+1}} = \frac{2}{h_i + h_{i+1}} \mu_i \left[ v_{i+1/2} \lambda_{i+1/2} \frac{y_{i+1} - y_i}{h_{i+1}} - v_{i-1/2} \lambda_{i-1/2} \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} \right] + \varphi_i, \quad (3.30)$$

$$y_i(t_0) = u_0(x_i), \quad i = \overline{1, n}; \quad j = 0, \quad (3.31)$$

$$c \quad \frac{r_1 h_i}{2} \left( C_0 \frac{y_0 - \hat{y}_0}{\tau_{j+1}} + \varphi_0 \right) = r_1 \mu_0 v_{\frac{1}{2}} \lambda_{\frac{1}{2}} \frac{y_1 - y_0}{h_1} - \mu_0 v_0 (z_1(y_0) y_0 - \theta_1(t_{j+1}, y_0)), \quad 0 \leq j \leq m, \quad (3.32)$$

$$c \quad \frac{r_2 h_{n-1}}{2} \left( C_n \frac{y_n - \hat{y}_n}{\tau_{j+1}} + \varphi_n \right) = r_2 \mu_n v_{\frac{n-1}{2}} \lambda_{\frac{n-1}{2}} \frac{y_n - y_{n-1}}{h_{n-1}} - \mu_n v_n (z_2(y_n) y_n - \theta_2(t_{j+1}, y_n)). \quad (3.33)$$

Упростим разностную схему (3.30) – (3.33), предполагая  $h = \text{const}$ ,

$$T = \text{const} : c_i \frac{y_i^{j+1} - y_i^j}{\tau} = \frac{\mu_i}{h^2} \left[ v_{i+1/2} \lambda(y^{j+1}) (y_{i+1}^{j+1} - y_i^{j+1}) - v_{i-1/2} \lambda(y^{j+1}) (y_i^{j+1} - y_{i-1}^{j+1}) \right] + \varphi(y_i^{j+1}). \quad (3.34)$$

Далее полагая, что  $\lambda = \lambda(y^j), \varphi = \varphi(y^j)$ , получим схему, линейную относительно  $y_i^{j+1}$ :

$$c_i \frac{y_i^{j+1} - y_i^j}{\tau} = \frac{\mu_i}{h^2} \left[ v_{i+1/2} \lambda(y^j) (y_{i+1}^{j+1} - y_i^{j+1}) - v_{i-1/2} \lambda(y^j) (y_i^{j+1} - y_{i-1}^{j+1}) \right] + \varphi(y_i^{j+1}). \quad (3.35)$$

Решение разностной краевой задачи для  $y_i^{j+1}$  находится методом прогонки [12].

Разностная схема (3.34) нелинейна относительно  $y_i^{j+1}$ . Для решения получающейся системы нелинейных уравнений применяются итерационные методы.

Преобразуем разностную схему (3.34), вводя обозначения:

$$A_i^s = \frac{\tau}{h^2} \lambda_i^s(y^s); \quad B_i^s = A_i^s + A_{i+1}^s + 1; \quad F_i^s = y_i^s + \tau \varphi(y_i^s), \quad \text{где } s = 0, 1, 2, \dots - \text{номер итерации.}$$

В результате получим систему нелинейных алгебраических уравнений вида

$$A_i^s y_{i-1}^{s+1} - B_i^s y_i^{s+1} + A_{i+1}^s y_{i+1}^{s+1} = -F_i^s. \quad (3.36)$$

В качестве нулевого приближения обычно берут значение  $y_i^j$  с предыдущего временного слоя

$$y_i^0 = y_i^j.$$



Решение уравнений (3.36) относительно  $y_i^{s+1}$  с краевыми условиями при  $i=0, i=N$  находится методом прогонки [12]. Для окончания итераций используется условие  $\max_{1 \leq i \leq N-1} \left| y_i^{s+1} - y_i^s \right| < \varepsilon$  или же задается определенное число итераций. Обычно уже две-три итерации заметно повышают точность. Неявные схемы вида (3.34) позволяют для обеспечения заданной точности использовать более крупный шаг по времени по сравнению с линейными (безытерационными) схемами (3.35), что зачастую приводит к значительному уменьшению объема вычислительной работы.

*Решение систем разностных уравнений методом прогонки.*

Неявные схемы (3.34, 3.35) для уравнения теплопроводности приводит к системе алгебраических уравнений относительно искомой функции  $y_i = y_i^{j+1}$  на новом временном слое  $t = t_{j+1}$ . Эта система уравнений имеет вид:

$$A_i y_{i-1} - B_i y_i + D_i y_{i+1} = -F_i, \quad i = \overline{1, n-1}; \quad (3.36)$$

$$y_0 = \chi_1 y_1 + v_1; \quad (3.37)$$

$$y_n = \chi_2 y_{n-1} + v_2,$$

где 
$$A_i = \frac{2\tau_{j+1}}{(h_i + h_{i+1})h_i} v_{i-1/2} \lambda_{i-1/2}; \quad D_i = \frac{2\tau_{j+1}}{(h_i + h_{i+1})h_i} v_{i+1/2} \lambda_{i+1/2};$$

$$F_i = \varphi_i \tau_{j+1} + B_i \hat{y}_i;$$

$$\chi_1 = \frac{\frac{r_1 \mu_0 v_1 \lambda_1}{\frac{2}{2}}}{h_1};$$

$$\frac{r_1 h_1}{2\tau_{j+1}} C_0 + \frac{\frac{r_1 \mu_0 v_1 \lambda_1}{\frac{2}{2}}}{h_1} + \mu_0 v_1 z_1(y_0)$$

$$\vartheta_1 = \frac{\mu_0 v_1 \theta_1(t_{j+1}, y_0) + \frac{r_1 C_0 h_1}{2\tau_{j+1}} \hat{y}_0 - \frac{r_1 h_1}{2} \varphi_0}{\frac{r_1 h_1}{2\tau_{j+1}} C_0 + \frac{\frac{r_1 \mu_0 v_1 \lambda_1}{\frac{2}{2}}}{h_1} + \mu_0 v_1 z_1(y_0)};$$

$$\chi_2 = \frac{\frac{r_2 \mu_n v_{n-1/2} \lambda_{n-1/2}}{h_1}}{\frac{r_2 h_{n-1}}{2\tau_{j+1}} c_n + \frac{r_2 \mu_n v_{n-1/2} \lambda_{n-1/2}}{h_{n-1}} + \mu_n v_n z_2(y_n)};$$

$$v_1 = \frac{\mu_n v_n \theta_2(t_{j+1}, y_n) + \frac{r_2 C_n h_{n-1}}{2\tau_{j+1}} \hat{y}_n - \frac{r_2 h_n}{2} \varphi_n}{\frac{r_2 h_{n-1}}{2\tau_{j+1}} c_n + \frac{r_2 \mu_n v_{n-1/2} \lambda_{n-1/2}}{h_{n-1}} + \mu_n v_n z_2(y_n)}.$$

Задача (3.36), (3.37) разрешима, если  $A_i > 0, D_i > 0, B_i \geq A_i + D_i, \quad 0 \leq \chi_{1,2} < 1$ . Для нахождения ее решения можно применять обычные методы линейной алгебры или методы итераций. Однако наиболее выгодным или экономичным по объему затрачиваемой работы является метод прогонки или метод факторизации, учитывающий специальный вид матрицы системы уравнений (3.36) – ее трехдиагональности.

Будем искать решение задачи (3.36), (3.37) в виде

$$y_i = \eta_{i+1}y_{i+1} + \gamma_{i+1}, \quad i = \overline{0, n-1}, \quad (3.38)$$

где  $\eta_i, \gamma_i$  – неизвестные пока функции. Подставляя  $y_{i-1} = \eta_i y_i + \gamma_i$  в (3.36), исключим  $y_{i-1}$  и получим  $(A_i \eta_i - B_i) \eta_{i+1} + D_i y_{i+1} + (A_i \gamma_i + F_i) = 0$ , после чего при помощи (3.38) исключим  $y_i$

$$[(A_i \eta_i - B_i) \eta_{i+1} + D_i] y_{i+1} + [(A_i \eta_i - B_i) \gamma_{i+1} + (A_i \gamma_i + F_i)] = 0.$$

Уравнение (3.36) будет удовлетворено, если выражения в квадратных скобках равны нулю. Из этих двух равенств находим рекуррентные формулы для определения  $\eta_{i+1}, \gamma_{i+1}$ :

$$\eta_{i+1} = \frac{D_i}{B_i - A_i \eta_i}, \quad \gamma_{i+1} = \frac{A_i \gamma_i + F_i}{B_i - A_i \eta_i}, \quad i = \overline{1, n-1}. \quad (3.39)$$

**1** Сравнивая формулу  $y_0 = \eta_1 y_1 + \gamma_1$  с краевым условием (3.37) –  $y_0 = \chi_1 y_1 + v_1$ , находим

$$\eta_1 = \chi_1, \quad \gamma_1 = v_1. \quad (3.40)$$

Далее, решая (3.39) с начальными условиями (3.40), найдем  $\eta_i, \gamma_i, i = 2, 3, \dots, n$ .

Определим  $y_n$  через  $\eta_n, \gamma_n$  из краевого условия (3.37) при  $i = n$ . Исключая  $y_{n-1}$  из формул

$$y_{n-1} = \eta_n y_n + \gamma_n \quad \text{и} \quad \begin{matrix} y_n = \chi_2 y_{n-1} + \\ v_2 \end{matrix} \quad \text{находим}$$

$$y_n = \frac{v_2 + \chi_2 \gamma_n}{1 - \chi_2 \eta_n}, \quad (3.41)$$

при условии, что  $1 - \chi_2 \eta_n \neq 0$ .

Из условий разрешимости системы (3.36), (3.37) следует  $0 \leq \eta_i < 1$  для всех  $i = \overline{1, n}$ .

Алгоритм решения задачи (3.36), (3.37):

**1** По начальным данным (3.40) и формулам (3.39) последовательно определяются  $\eta_i$ , затем  $\gamma_n$  для  $i = 1, 2, 3, \dots, n$  (счет идет слева направо – от  $i$  к  $i+1$ );

**2** Из (3.41) находится  $y_n$  и затем по формуле (3.38) последовательно (справа налево – от  $i+1$  к  $i$ ) определяются  $y_{n-1}, y_{n-2}, \dots, y_1, y_0$ .

Счет по формулам (3.38) устойчив, так как  $0 \leq \eta_i < 1$ .

Существует еще один вариант формул прогонки:

$$\alpha_i = \frac{A_i}{B_i - D_i \alpha_{i+1}}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad \alpha_n = \chi_2; \quad (3.42)$$

$$\beta_i = \frac{D_i \beta_{i+1} + F_i}{B_i - D_i \alpha_{i+1}}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad \beta_n = v_2; \quad (3.43)$$

$$y_{i+1} = \alpha_{i+1} y_i + \beta_{i+1}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \quad y_0 = \frac{v_1 + \chi_1 \beta_1}{1 - \chi_1 \alpha_1}. \quad (3.44)$$

Алгоритм: 1) по формулам (3.42) и (3.43) последовательно от  $i+1$  к  $i$  (справа налево) определяются сначала  $\alpha_i$ , затем  $\beta_i$  для  $i = n-1, n-2, \dots, 1, 0$ ; 2) по формулам (3.44) последовательно от  $i$  к  $i+1$  (слева направо) находятся  $y_1, y_2, \dots, y_n$ .

Нетрудно убедиться в том, что число арифметических операций, производимых при решении задач (3.36), (3.37), пропорционально числу уравнений.

**Моделирование процесса сушки в кипящем слое.**

**Специальный метод организации контакта дисперсной твердой фазы с газовой или жидкой фазами – метод псевдооживленного слоя – получил распространение для ряда технологических процессов в химической, пищевой и смежных отраслях промышленности. Общим свойством псевдооживленных слоев является интенсивное перемешивание частиц, что способствует выравниванию переменных состояния процесса по объему слоя. Отсутствие застойных зон в рационально образованном псевдооживленном слое обеспечивает хороший контакт всей поверхности частиц с оживающим агентом. Такой способ имеет определенные преимущества по сравнению с методами неподвижного и движущегося слоев дисперсного материала: сравнительно простая техника непрерывной выгрузки дисперсного материала из рабочей зоны, возможность повышать производительность аппарата по сплошной фазе без увеличения гидродинамического сопротивления, равномерное распределение температуры в объеме псевдооживленного слоя, что существенно при проведении экзотермических процессов.**

Наряду с достоинствами методу псевдооживленного слоя присущи и некоторые недостатки. Так высушиваемые частицы в слое имеют неодинаковое время пребывания. Интенсивное перемешивание твердой фазы приводит к частичному перемешиванию оживающего агента, что суммарно уменьшает движущую силу (разность температур, концентраций, влагосодержаний) в объеме слоя. Псевдооживленные частицы при их энергичном циркуляционном движении в объеме псевдооживленного слоя могут заметно истираться, появляется склонность к образованию агрегатов, а газовая фаза образует пузыри, которые поднимаются вверх по слою.

Сушильный аппарат с псевдооживленным слоем приведен на рис. 3.14. Влажный материал непрерывно загружается в аппарат 1 через патрубок 2, и высушенный материал выгружается через патрубок 3. Сушильный агент подается в аппарат 1 снизу на трубную решетку 4 и создает кипящий слой 5.

Сложный характер движения дисперсной и газовой фаз через псевдооживленный слой не позволяет удовлетворительно описать такое движение без использования формальных модельных представлений.

Примем допущения, позволяющие упростить задачи расчета.

1. Кинетика сушки одиночной частицы может быть принята соответствующей периоду постоянной скорости, определяемой интенсивностью подвода теплоты от сушильного агента к поверхности влажной частицы [4], что означает

$$\frac{du}{d\tau} = -N, \quad (3.45)$$

где  $u$  – влагосодержание;  $N = \alpha F_r (\bar{t} - t_m) / (V_r \rho_r r_{исп})$ ;  $F_r$ ,  $V_r$ ,  $\rho_r$  – поверхность, объем и плотность частицы;  $\alpha$  – коэффициент теплоотдачи от сушильного агента к поверхности влажной частицы;  $r_{исп}$  – теплота испарения;  $t_m$  – температура мокрого термометра;  $\bar{t}$  – средняя по высоте псевдооживленного слоя температура сушильного агента.

2. Считается, что температура влажных частиц равномерна по их радиусу и равна температуре мокрого термометра  $t_m$  до тех пор, пока частица не достигнет равновесного влагосодержания  $u^*$ , после чего значение влагосодержания остается постоянным  $u = u^*$ , а ее температура  $T_r$  практически мгновенно достигает средней по высоте псевдооживленного слоя температуры сушильного агента  $T_r = \bar{t}$  (рис. 3.15).

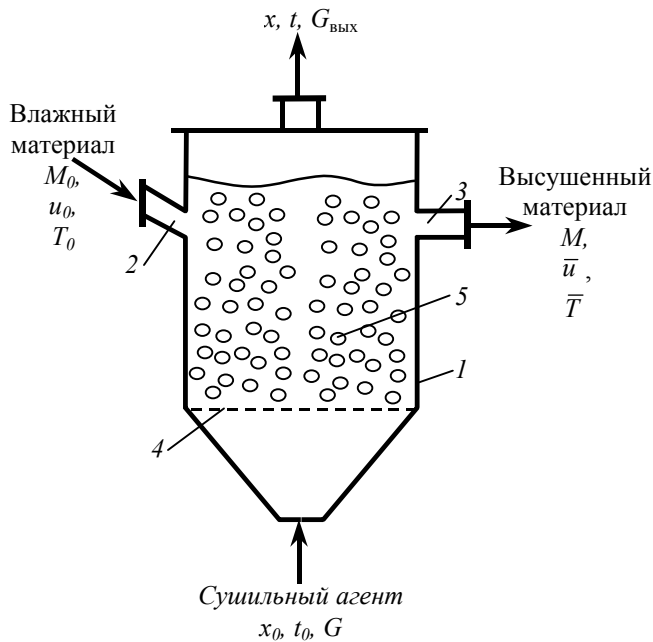


Рис. 3.14 Сушильная установка с псевдооживленным слоем

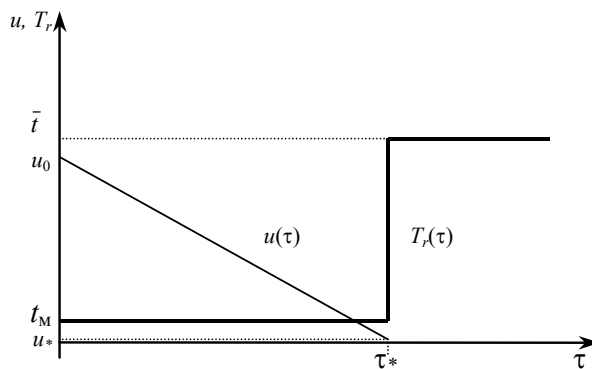


Рис. 3.15 Изменение влагосодержания  $u(\tau)$  и температуры  $T_r(\tau)$  влажной частицы при ее сушке в периоде постоянной скорости

**ВОЗМОЖНОСТЬ ПОСЛЕДНЕГО УПРОЩЕНИЯ ОСНОВАНА НА ТОМ, ЧТО ВРЕМЯ КОНВЕКТИВНОГО НАГРЕВА ПРАКТИЧЕСКИ СУХИХ ЧАСТИЦ ДИАМЕТРОМ НЕСКОЛЬКО МИЛЛИМЕТРОВ В СООТВЕТСТВИИ С ТЕОРИЕЙ НЕСТАЦИОНАРНОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ [12] СОСТАВЛЯЕТ МАКСИМУМ НЕСКОЛЬКО МИНУТ, ТОГДА КАК СРЕДНЕЕ ВРЕМЯ ПРЕБЫВАНИЯ ЧАСТИЦ МАТЕРИАЛА В СУШИЛЬНЫХ АППАРАТАХ ОБЫЧНО ЗНАЧИТЕЛЬНО БОЛЬШЕ. ТЕМПЕРАТУРА ВЛАЖНЫХ ЧАСТИЦ, ПОСТУПАЮЩИХ В АППАРАТ, ДЛЯ ПРОСТОТЫ ПРИНИМАЕТСЯ РАВНОЙ  $T_M$ .**

3 Гидродинамика псевдооживленного слоя может быть принята соответствующей режиму полного (идеального) смещения, что позволяет записать выражение для плотности распределения частиц в слое по времени их пребывания  $\tau$

$$P(\tau) = \frac{1}{\bar{\tau}} \exp\left(-\frac{\tau}{\bar{\tau}}\right). \quad (3.46)$$

4 Движение сушильного агента через слой можно принять соответствующим режиму идеального вытеснения.

5 Частицы высушиваемого материала монодисперсны.

Совместный анализ соотношений для плотности распределения частиц по времени их пребывания в псевдооживленном слое (3.46) и для кинетики сушки дисперсного материала (3.45) приводит к распределению дисперсного материала по влагосодержанию на выходе из аппарата

$$P(u) = (N\bar{\tau})^{-1} \exp[-(u_0 - u)/N\bar{\tau}], \quad u_* \leq u \leq u_0.$$

**Доля  $\mu$  материала, который находится в псевдооживленном слое в течение времени, большего  $\tau_* = (u_0 - u_*)/N$ , имеет одинаковое влагосодержание  $u_*$ . Значение этой доли определяется интегрированием (3.46) в пределах от  $\tau = \tau_*$  до  $\tau \rightarrow \infty$ :**

$$\mu = \int_{\tau_0}^{\infty} \bar{\tau}^{-1} \exp(-\tau/\bar{\tau}) d\tau = \exp(-\tau_*/\bar{\tau}) = \exp[-(u_0 - u_*)/N\bar{\tau}]. \quad (3.47)$$

Соответственно, доля влажного материала, влагосодержание которого неодинаково и превышает  $u_*$ , равна  $1 - \mu = 1 - \exp[-(u_0 - u_*)/N\bar{\tau}]$ .

Величина коэффициента скорости сушки в уравнении (3.45) в рассматриваемом случае зависит от средней по высоте псевдооживленного слоя температуры сушильного агента  $\bar{t}$ :  $N = 6\alpha(\bar{t} - t_M)/(r_{исп}\rho_T d)$ , где  $6/d = F_r/V_r$ ,  $d$  – диаметр частиц.

Кроме того, полное перемешивание частиц материала и его равномерное распределение по объему слоя означает, что сушильный агент в свою очередь взаимодействует с материалом, имеющим некоторую среднюю температуру, несмотря на то, что сам слой состоит из двух частей с различными температурами.

Значение средней температуры материала в псевдооживленном слое может быть определено как среднее взвешенное из температур влажной и сухой доли

$$\bar{T} = t_M(1 - \mu) + \bar{t} \mu. \quad (3.48)$$

Так как принято допущение о режиме полного вытеснения при движении сушильного агента через псевдооживленный слой материала, то профиль температур сушильного агента по высоте слоя соответствует экспоненциальной зависимости

$$t(h) = \bar{T} + (t_0 - \bar{T}) \exp\{-[6\alpha(1 - \varepsilon)/(cGd)]Sh\},$$

где  $G$  – расход сушильного агента;  $S$  – поперечное сечение аппарата;  $\varepsilon$  – порозность кипящего слоя;  $c$  – теплоемкость сушильного агента;  $h$  – текущая координата высоты слоя.

Определим среднюю температуру сушильного агента в аппарате

$$\bar{t} = \frac{1}{H} \int_0^H t(h) dh = \bar{T} + [(t_0 - \bar{T})(1 - e^{-BH}) / (BH)], \quad (3.49)$$

где  $B = 6\alpha(1 - \varepsilon)S / (cGd)$ .

Составим уравнение теплового баланса для всего аппарата:

$$G[(c + c_{\text{п}}x_0)t_0 - (c + c_{\text{п}}x_k)t_k - r_{\text{исп}}x_k] + \rho_{\text{T}}V_{\text{T}}[(c_{\text{T}} + c_{\text{B}}u_0)T_0 - (c_{\text{T}} + c_{\text{B}}\bar{u})t_{\text{M}} - (c_{\text{T}} + c_{\text{B}}u_*)\mu(\bar{t} - t_{\text{M}})] = 0. \quad (3.50)$$

где среднее влагосодержание материала, выгружаемого из псевдооживленного слоя, вычисляется суммированием количества влаги во влажной доле материала и остаточной влаги в доле материала с влагосодержанием  $u_*$ :

$$\bar{u} = \int_{u_*}^{u_0} uP(u) du + \mu u_* = u_0 - N\bar{\tau} \left[ 1 - \exp\left(\frac{u_0 - u_*}{N\bar{\tau}}\right) \right]. \quad (3.51)$$

Влагосодержание сушильного агента на выходе из аппарата определяется из баланса по испаряемой из материала влаге

$$M(u_u - \bar{u}) = G(x_k - x_0). \quad (3.52)$$

Заметим, что в общем случае  $t_{\text{M}}$  и  $u_*$  являются функциями температуры и влагосодержания сушильного агента, т.е.  $t_{\text{M}} = t_{\text{M}}(\bar{t}, \bar{x})$ ,  $u_* = u_*(\bar{t}, \bar{x})$ . Зависимость  $u_*(\bar{t}, \bar{x})$  определяется экспериментально, а явный вид зависимости  $t_{\text{M}}(\bar{t}, \bar{x})$  может быть получен из термодинамической диаграммы состояния паровоздушной смеси (диаграммы Рамзина).

Вычисление среднего по высоте псевдооживленного слоя влагосодержания сушильного агента требует знания распределения  $x$  по высоте слоя. Заметим, что теплота, получаемая влажной долей материала  $(1 - \mu)$  в пределах элементарного слоя высотой  $dh$ , расходуется на испарение из частиц влаги, которая переходит в поток сушильного агента и повышает его влагосодержание на величину  $dx$ :

$$\frac{6\alpha(1 - \varepsilon)}{r_{\text{исп}}d} S(1 - \mu)(t - t_{\text{M}}) dh = Gdx. \quad (3.53)$$

Подстановкой выражения для  $t$  в (3.53) можно получить распределение влагосодержания сушильного агента по высоте псевдооживленного слоя

$$S \frac{dx}{dh} = \frac{6\alpha(1 - \varepsilon)}{Gr_{\text{исп}}d} s(1 - \mu)(t - t_{\text{M}}),$$

а интегрирование последнего выражения в пределах  $h = 0 \dots H$  приводит к следующему соотношению

$$\bar{x} = x_0 + \frac{c(1-\mu)}{2r_{исп}} \left[ (\bar{T} - t_m)B + 2(t_0 - \bar{T}) \left( 1 - \frac{1 - \exp(-BH)}{BH} \right) \right]. \quad (3.54)$$

Связь между скоростью сушильного агента, размером частиц материала, их плотностью и порозностью слоя может быть получена через соотношение

$$Re = \frac{\varepsilon^{4,75} Ar}{18 + 0,6\sqrt{Ar\varepsilon^{4,75}}}. \quad (3.55)$$

Наконец, величина коэффициента межфазной теплоотдачи  $\alpha$  может быть рассчитана по критериальной зависимости:

$$Nu = 2 + 0,35 Re^{0,58} Pr^{0,36} + 0,03 Re^{0,54} Pr^{0,33}. \quad (3.56)$$

Система уравнений (3.45) – (3.56) представляет собой математическое описание процесса непрерывной сушки дисперсного материала в псевдооживленном слое в рамках сделанных допущений.

Анализ системы уравнений (3.45) – (3.56) показывает, что задача имеет две степени свободы, так как число неизвестных ( $t_m, u_*, \bar{t}, \bar{x}, \bar{T}, B, H, t_k, S, \varepsilon, \alpha, G, N, w$ ) здесь превышает число независимых соотношений, описывающих процесс сушки. Таким образом, процесс сушки, возможно, реализовать при различных комбинациях параметров: порозности слоя  $\varepsilon$  и средней температуры  $\bar{t}$  сушильного агента.

При расчете процесса сушки дисперсных материалов в псевдооживленном слое исходными данными являются: производительность по влажному материалу  $M$  (кг/ч),  $t_0, u_0, \bar{u}$  и задаются  $\varepsilon$  и  $\bar{t}$ .

### Алгоритм.

*Шаг 1.* Расчет скорости сушильного агента  $\omega$  из условия псевдооживления:  $\omega_{кр} < \omega < \omega_{вит}$ .

Связь между скоростью сушильного агента  $\omega$ , диаметром частиц  $d$  и их плотностью  $\rho_r$  и порозностью слоя  $\varepsilon$  определяется критериальным уравнением (3.55):

$$Re = \frac{\omega d}{\nu} = \frac{\varepsilon^{4,75} Ar}{18 + 0,6\sqrt{Ar\varepsilon^{4,75}}}, \quad Ar = \frac{d^3 \rho_r g}{\nu^2 \rho_s}.$$

При  $\varepsilon = 0,4$  получим  $Re_{кр} = \frac{Ar}{1400 + 5,22\sqrt{Ar}}$ ;  $Re_{вит} = \frac{Ar}{18 + 0,6\sqrt{Ar}}$ .

Скорость сушильного агента выбирают как  $\omega = (2...3)\omega_{кр} < \omega_{вит}$ .

*Шаг 2.* Вычисление коэффициента межфазного теплообмена  $\alpha$  из выражения для  $Nu$  (3.56):

$$Nu = 2 + 0,35 \cdot Re^{0,58} Pr^{0,36} + 0,03 \cdot Re^{0,54} Pr^{0,33} \quad \text{или} \quad Nu = 0,4 \left( \frac{Re}{\varepsilon} \right)^{0,67} Pr^{0,33}, \quad \text{где } Pr = \nu/a, \quad a - \text{коэффициент теплопроводности при } \bar{t}.$$

ратуропроводности при  $\bar{t}$ .

*Шаг 3.* Определение зависимостей  $u_* = u_*(\bar{t}, \bar{x})$ ,  $t_M = t_M(\bar{t}, \bar{x})$ , где  $\bar{x}$  – задается ориентировочно, и итерационный расчет среднего времени пребывания  $\bar{\tau}$  частиц в кипящем слое из выражений (3.47),

(3.51):

$$\mu = \exp\left[-\frac{(u_0 - u_*)}{N\bar{\tau}}\right], \quad \bar{u} = u_0 - N\bar{\tau}[1 - \mu(\bar{\tau})],$$

где  $\bar{u}$  – задано,  $N = \frac{6\alpha(\bar{t} - t_M)}{(r_{исп}\rho_T d)}$ .

*Шаг 4.* Расчет объема кипящего слоя  $V$ :

$$V = \frac{M\bar{\tau}}{\rho_T(1-\varepsilon)}, \quad \text{где } M\bar{\tau} - \text{вес слоя.}$$

*Шаг 5.* Вычисление расхода сушильного агента  $G$  и  $x_k$  из соотношений (3.50) и (3.52):

$$G[(c + c_{п}x_0)t_0 - (c + c_{п}x_k)t_k - r_{исп}x_k] + M[(c_T + c_B u_0)T_0 - (c_T + c_B \bar{u})t_M - (c_T + c_B u_*)\mu(\bar{t} - t_M)] = 0,$$

$$M(u_0 - \bar{u}) = G(x_k - x_0).$$

*Шаг 6.* Вычисление площади газораспределительной решетки  $F$  и площади поперечного сечения  $S$  сепарационной зоны сушилки:

$$F = \frac{G}{\omega}; \quad S = (1,2 \dots 1,3)F.$$

*Шаг 7.* Определение высоты слоя  $H$  в аппарате:

$$H = (1,5 \dots 2) \frac{V}{S}.$$



Шаг 8. Расчет новых значений  $\bar{t}_n, \bar{x}_n$ :

$$\bar{t}_n = \bar{T} + [(t_0 - \bar{T})(1 - e^{-BH}) / (BH)];$$

$$\bar{x}_n = x_0 + \frac{c(1 - \mu)}{2r_{исп}} \left[ (\bar{T} - t_m)B + 2(t_0 - \bar{T}) \left( 1 - \frac{1 - e^{-BH}}{(BH)} \right) \right];$$

$$B = 6\alpha(1 - \varepsilon)S / (cGd);$$

$$\bar{T} = t_m(1 - \mu) + \bar{t}\mu,$$

и проверке условий сходимости итерации: если  $\left| \frac{\bar{t}_n - \bar{t}}{\bar{t}} \right| \leq \varepsilon_1$  и  $\left| \frac{\bar{x}_n - \bar{x}}{\bar{x}} \right| \leq \varepsilon_2$ , то расчет закончить; в противном случае  $\bar{x} := \bar{x}_n, \bar{t} := \bar{t}_n$  и перейти к шагу 1 и т.д. до тех пор, пока не выполняются условия сходимости итераций на шаге 8.

*Сушка зерновых культур в аппарате с кольцевым движущимся слоем.*

Развитие фермерских хозяйств предусматривает рациональную организацию мини-пунктов переработки и хранения зерна, в особенности, семенного и селекционного, что требует создания малогабаритной высокопроизводительной сушильной техники, предназначенной для осуществления процессов сушки и активного вентилирования при первичной обработке и хранении зерна.

Экспериментальные исследования кинетики сушки различных зерновых культур показали, что зерно можно отнести к классу дисперсных материалов с высоким внутридиффузионным сопротивлением [14 – 16].

Экспериментально полученные кривые сушки для зерновых культур (ржи «Саратовская 5» и ячменя «Дворан») и определенные на их основе экспериментальные зависимости эффективного коэффициента диффузии влаги от влагосодержания зерна и температуры приведены на рис 3.16 – 3.19.

Характер зависимостей  $D_e = f(u)_t$  для зерновых культур свидетельствуют об их коллоидном капиллярно-пористом строении и капиллярно-диффузионном механизме переноса влаги. При этом значения чисел  $Bi_m$  в указанных интервалах температур находились в пределах  $(20 \dots 250) \cdot 10^6$ , что свидетельствует о рассмотрении задачи внутреннего массопереноса. Малые значения чисел Фурье ( $Fo \approx 10^{-3}$ ) и Лыкова

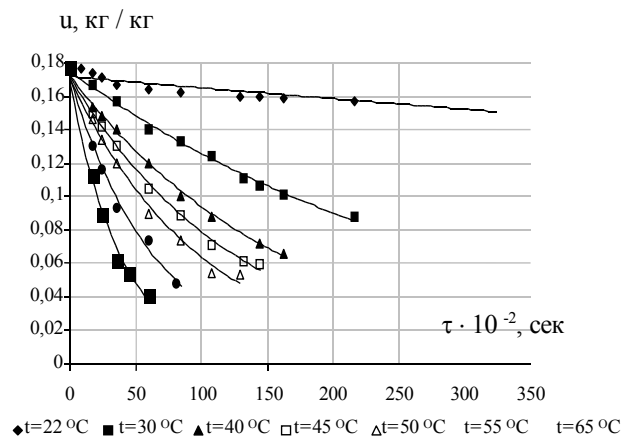


Рис. 3.16 Кривые сушки семян ржи «Саратовская 5»

при различной температуре сушильного агента

( $Lu \approx 10^{-4} \dots 10^{-3}$ ) свидетельствуют о значительной влагоинерционности исследуемых материалов, что подтверждается экспериментально в связи с малым временем их прогрева (2750 с) и длительностью процесса сушки (более 30 000 с).

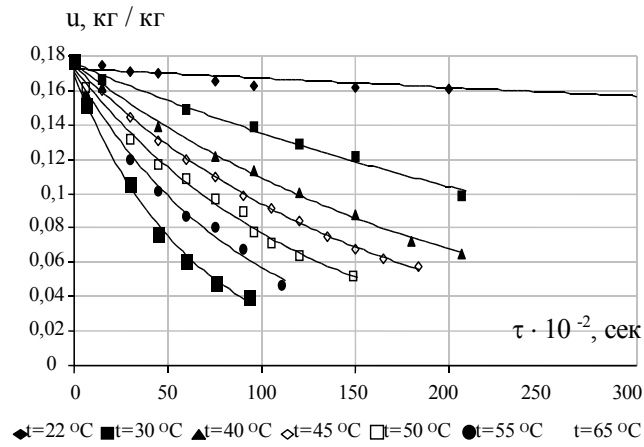


Рис. 3.17 Кривые сушки семян ячменя "Дворан" при различной температуре сушильного агента

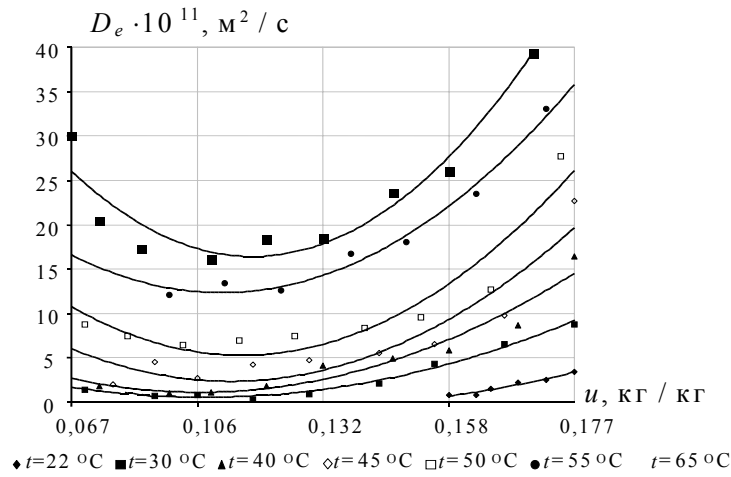
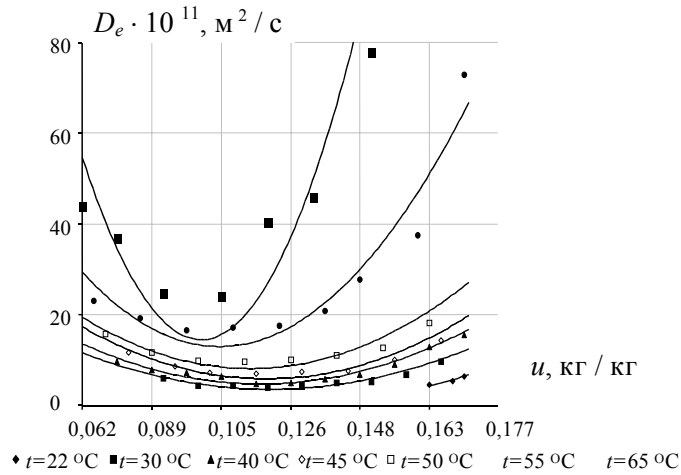
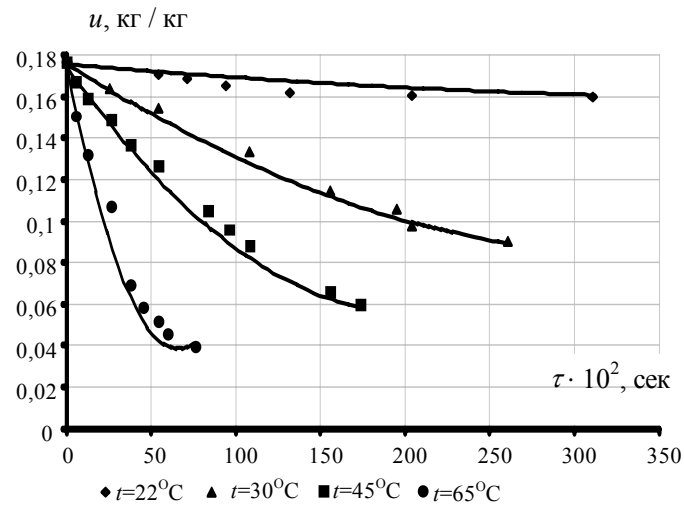


Рис. 3.18 Зависимости  $D_e = f(u)_t$  для ржи "Саратовская 5"

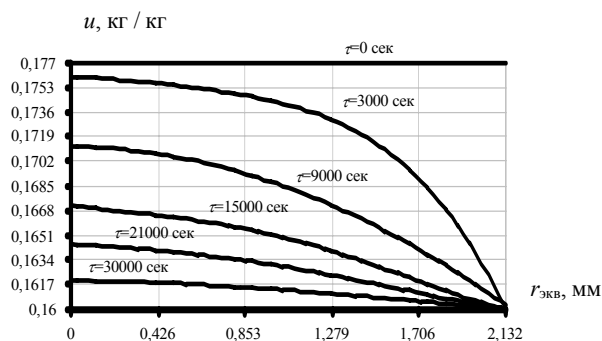


**Рис. 3.19** Зависимости  $D_e = f(u)_t$  для ячменя "Дворан"

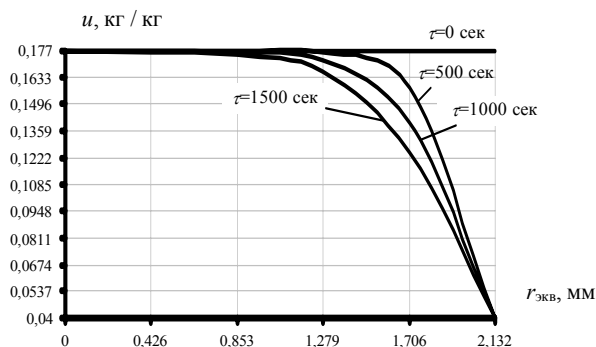


**Рис. 3.17** Расчетные кривые сушки семян пшеницы "Безенчукская 139" (точки – экспериментальные данные)

На основе уравнения массопроводности и полученных зависимостей  $D_e = f(u)_t$  нами проведены расчеты кинетики сушки одиночной частицы (рис. 3.20) и распределения влагосодержания по радиусу частицы при сушке семян указанных зерновых культур при различной температуре сушильного агента (рис. 3.21). При этом принималось, что на поверхности частицы устанавливается равновесное влагосодержание, соответствующее температуре и влагосодержанию сушильного агента [17]. Максимальная относительная погрешность расчета кинетики сушки одиночной частицы исследуемых зерновых культур не превышает 10 %, что свидетельствует об удовлетворительном описании кинетики сушки указанных зерновых культур с помощью уравнения массопроводности.



**Рис. 3.21** Распределение влагосодержания по радиусу частицы при сушке семян пшеницы "Безенчукская 139" при температуре сушильного агента  $t = 22 \text{ }^\circ\text{C}$ ,  $x = 0,01 \text{ кг/кг}$

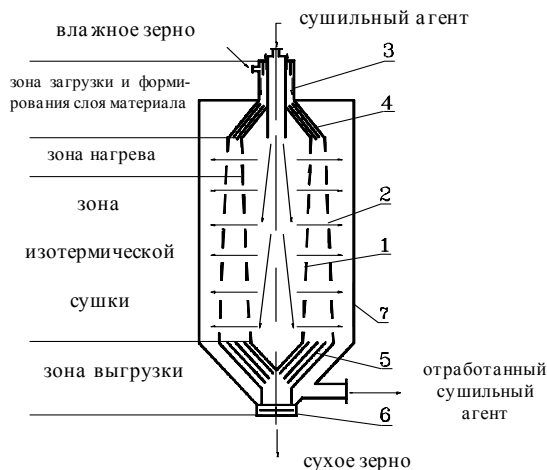


**Рис. 3.22** Распределение влагосодержания по радиусу частицы

## при сушке семян пшеницы "Безенчукская 139"

при температуре сушильного агента  $t = 65\text{ }^{\circ}\text{C}$ ,  $x = 0,01\text{ кг/кг}$

Согласно рекомендациям [15 – 18] при сушке семенного зерна с влажностью до 0,2 кг/кг используется сушильный агент с температурой 65 ... 70 °С. Как показали проведенные нами экспериментальные исследования и расчеты, при использовании сушильного агента с такой температурой на поверхности частицы очень быстро устанавливается равновесное влагосодержание 0,04 кг/кг (рис. 3.22), что является причиной пересушки материала (закал зерна) и снижение посевных качеств зерна. При использовании сушильного агента с низкой температурой, соответствующей режиму активного вентилирования, например,  $t = 22\text{ }^{\circ}\text{C}$ , на поверхности зерна устанавливается равновесное влагосодержание 0,16 кг/кг, равное влагосодержанию "сухого" зерна, а в центре зерна 0,1617 кг/кг (рис. 3.21). При таком режиме сушки не происходит закала поверхностных слоев зерна и, как следствие, вздутия зерна, вызванного задержкой паров испаряющейся влаги. Поверхностные и внутренние слои зерна имеют влагосодержание, близкое к кондиционному. Исходя из этих предпосылок, окончательный выбор температурного режима сушки исследуемых зерновых культур в промышленном аппарате будет осуществляться нами при решении задачи оптимизации конструктивных и режимных параметров сушильной установки.



**Рис. 3.23 Сушилка с движущимся плотным поперечно-продуваемым кольцевым слоем:**

1 – внутренняя перфорированная стенка; 2 – наружная перфорированная стенка; 3 – верхняя конусная часть; 4, 5 – распределительные конуса; 6 – выгрузное устройство; 7 – корпус

Для возможности проведения расчетов сушильного аппарата и анализа различных режимов сушки зерновых культур нами составлено математическое описание процесса и аппарата сушки. За базовый аппарат принята сушилка с движущимся плотным поперечно-продуваемым кольцевым слоем (рис. 3.23).

Схема движения фаз в кольцевой камере сушильного аппарата может быть представлена следующим образом. Влажный материал подается в кольцевую камеру сушилки, заполняя все пространство зон предварительного нагрева и сушки. Сушильный агент по центральной распределительной трубе поступает в зону сушки, где поперечно продувается через кольцевой слой движущегося материала. После чего отработанный сушильный агент выбрасывается в атмосферу. Высушенный материал непрерывно выгружается из аппарата.

При моделировании процесса сушки в движущемся слое принята следующая расчетная схема: 1) аналогом непрерывного процесса сушки в движущемся слое может быть периодический процесс сушки в неподвижном слое; 2) неподвижный слой разбивается на конечное число элементарных слоев (размер которых подбирается экспериментально); 3) частицы высушиваемого материала в первом приближении имеют цилиндрическую форму с эквивалентным радиусом  $R_{\text{экв}}$ ; 4) режим фильтрации сушильного агента через неподвижный слой близок к режиму идеального вытеснения.

С учетом принятой схемы модель кинетики сушки дисперсных материалов с высоким внутридиффузионным сопротивлением для  $i$ -го элементарного слоя имеет вид:

$$G_i(\bar{u}_i^{j-1} - \bar{u}_i^j) = L(x_{i-1} - x_i)\tau_j, i = \overline{1, n}; j = \overline{1, m}; \quad (3.57)$$

$$Lc_{c.a.}(t_{i-1} - t_i)\tau_j = G_i r (\bar{u}_i^{j-1} - \bar{u}_i^j); \quad (3.58)$$

$$\tau_j = S / v_{c.a.}; \quad (3.59)$$

$$u_{ij} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r D_e(u_i, T) u_{ir}], 0 \leq r \leq R_{\text{экв}}, \tau > 0; \quad (3.60)$$

$$u_i(r, 0) = u_n, \quad u_{ir}(0, \tau) = 0, \quad u_i(R_{\text{экв}}, \tau) = u_p, \quad (3.61)$$

$$\bar{u}_i^j = \frac{2}{R_{\text{экв}}^3} \int_0^{R_{\text{экв}}} r u_i(r, \tau_j) dr, \quad (3.62)$$

где  $G_i$  – количество материала в  $i$ -ом слое, кг;  $\bar{u}_i^{j-1}$ ,  $\bar{u}_i^j$  – средние значения влагосодержания материала в моменты времени  $\tau_{j-1}$  и  $\tau_j$ , соответственно, кг/кг;  $x_i^{j-1}$ ,  $x_i^j$  – влагосодержание сушильного агента материала в моменты времени  $\tau_{j-1}$  и  $\tau_j$ , соответственно, кг/кг.

Алгоритм решения уравнений (3.57) – (3.62) включает следующие шаги.

*Шаг 1.* Рассчитывается шаг  $\tau_i$  по формуле (3.59) (на первом шаге  $j = 1$ ), задается номер  $i$  слоя (для первого слоя  $i = 1$ ) и значения  $t_i^{(v)} = t_{i-1}$ ;  $x_i^{(v)} = x_{i-1}$  (для первой итерации  $v = 1$ ). Определяется значение  $u_p(t_i^{(v)}, x_i^{(v)})$  и решается нелинейная краевая задача диффузии (3.60), (3.61) конечно-разностным методом с использованием разностной схемы неявного типа и четырехточечного шаблона [12]. Рассчитывается  $\bar{u}_i^j$  по формуле (3.62).

*Шаг 2.* Из уравнений (3.57), (3.58) определяются значения  $t_i$ ,  $x_i$  и осуществляется проверка выполнения условий сходимости итераций:

$$\left| (x_i - x_i^{(v)}) / x_i^{(v)} \right| \leq \delta_1, \quad \left| (t_i - t_i^{(v)}) / t_i^{(v)} \right| \leq \delta_2.$$

Если условия не выполняются, то производится уточнение задаваемых значений температуры и влагосодержания в  $i$ -ом слое:

$$t_i^{(v+1)} = (t_i + t_i^{(v)}) / 2; \quad x_i^{(v+1)} = (x_i + x_i^{(v)}) / 2$$

и осуществляется переход к шагу 1, в противном случае – к шагу 3.

*Шаг 3.* Принимается  $t_i^{(v)} = t_i$ ,  $x_i^{(v)} = x_i$ ,  $v = 1$ , номер слоя  $\langle i \rangle := i + 1$  и проверяем условие  $i > n$ . Если условие не выполняется, то следует переход к шагу 1, в противном случае – на следующий шаг.

*Шаг 4.* Проверяется условие

$$\left| \bar{u}_N - \bar{u}_{\text{зад}} \right| / \Delta u_{\text{зад}} \leq \delta_3,$$

если условие не выполняется, то задается новый шаг по времени  $\langle j \rangle := j + 1$  и следует переход к шагу 1. В противном случае расчет закончен.

Затем производится расчет габаритов сушильного аппарата с движущимся плотным поперечно-продуваемым кольцевым слоем, гидравлического сопротивления сушильного аппарата, мощности, затрачиваемой на продувку слоя материала в сушильной камере и мощности электрокалорифера [18, 19].

С целью расчета оптимальных конструктивных и режимных переменных сушильной установки, включающей основной сушильный аппарат, электрокалорифер и воздухоподувку, была сформулирована и решена задача оптимизации: для заданного материала и заданных значений производительности  $B_{\text{зад}}$  по сухому материалу, начального  $u_n$  и конечного  $u_k$  влагосодержаний высушиваемого материала требуется определить вариант  $a$  конструктивного оформления основного аппарата, типы  $b$  калорифера и воздухоподувки, угол раскрытия стенок  $\alpha_p(a)$  и толщину слоя  $S(a)$  в сушильной камере, число отдельных входов  $n$  сушильного агента, распределенных по высоте продуваемого слоя, начальные значения температуры  $t_n$  и влагосодержания  $x_n$  сушильного агента такие, что приведенные затраты ПЗ(●) на сушильную установку в целом достигают минимального значения, т.е.

$$\text{ПЗ}(a, b, \alpha_p, S, n, t_n, x_n) \Rightarrow \min_{a, b, \alpha_p, S, n, t_n, x_n}$$

при связях в форме уравнений математической модели (3.57) – (3.62) и ограничениях: на производительность установки

$$B(a, b, \alpha_p, S, n, t_n, x_n) = B_{\text{зад}};$$

на равномерность процесса сушки

$$u_{\text{корм}}(a, b, \alpha_p, S, n, t_n, x_n) - u_{\text{лоб}}(a, b, \alpha_p, S, n, t_n, x_n) \leq \Delta u_{\text{зад}};$$

на недопустимость перегрева материала  $T_m \leq T_{\text{доп}}$ ; на гидродинамический режим движения материала  $Re = f(a, \alpha_p, S) > 40$ ; на гидравлическое сопротивление аппарата  $\Delta P_a(a, S) \leq \Delta P_{\text{зад}}$ ; на условие окончания процесса сушки  $|u_{\text{корм}}(a, b, \alpha_p, S, n, t_n, x_n) - u_{\text{зад}}| \leq \varepsilon$ ; на конструктивные размеры основного аппарата

$$H_a(a, b, \alpha_p, S, n, t_n, x_n) \leq H_{\text{зад}}; \quad D_{\text{вн}}(a, b, \alpha_p, S, n, t_n, x_n) \leq D_{\text{зад}},$$

где  $\Delta u_{\text{зад}}, B_{\text{зад}}, T_{\text{доп}}, H_{\text{зад}}, D_{\text{зад}}, \varepsilon$  – заданные величины.

Сформулированная задача оптимизации относится к классу задач нелинейного программирования и для ее решения целесообразно использовать высокоэффективный метод последовательного квадратичного программирования. Выбор типа калорифера и воздухоподувки можно осуществлять прямым перебором серийно выпускаемых образцов оборудования.

В результате решения сформулированной задачи оптимизации для сушильной установки производительностью 1 т/ч по сухому зерну получены следующие оптимальные конструктивные и режимные параметры: температура сушильного агента  $t_n^* = 26$  °С; средняя толщина продуваемого слоя  $S^* = 290$  мм; угол раскрытия стенок сушильной камеры  $\alpha_p^* = 5,3^\circ$ ; скорость фильтрации сушильного агента  $v_{\text{ф}}^* = 0,186$  м/с; скорость движения материала  $v_m^* = 0,0002$  м/с; габаритные размеры аппарата: высота  $H_a^* = 4,0$  м, диаметр  $D_{\text{вн}}^* = 2,04$  м; гидравлическое сопротивление сушильного аппарата  $\Delta P_a^* = 2340$  Па; расход сушильного агента  $L = 2880$  м<sup>3</sup>/ч; установленная мощность электрокалорифера  $N_k^* = 9$  кВт; время пребывания материала в зоне сушки – шесть часов.

Выбор конструктивного варианта основного аппарата сушильной установки осуществлялся следующим образом. Как показали проведенные эксперименты и расчеты, а также анализ литературных данных [14, 15], сушка семенного зерна, лежащего на хранении, проводится при «мягких» температурных режимах и не требует предварительного нагрева материала. При сушке продовольственного или фуражного зерна используется сушильный агент с более высокой температурой (до 80 °С).

Вследствие этого, как показали проведенные эксперименты и расчеты, при низких значениях влагосодержания зерна температура и влагосодержание отработанного сушильного агента незначительно меняют свои начальные значения. При этом отработанный по влаге сушильный агент возможно ис-

пользовать для предварительного нагрева материала. Такая схема реализована в аппаратах с секционированной подачей сушильного агента в зоны нагрева и сушки материала, а также регулированием высоты этих зон.

Разработанные сушильные аппараты имеют ряд преимуществ перед традиционными. Во-первых, установка распределительных конусов в зонах загрузки и выгрузки устраняет образование застойных зон на входе и выходе из зон нагрева и изотермической сушки. Кроме того, минимальная толщина кольцевого слоя на входе в зону нагрева выбирается из условия  $Re > 40$ , что обеспечивает режим движения материала в зоне сушки, близкий к идеальному вытеснению [20]. Во-вторых, создание оптимальных условий нагрева и сушки материала обеспечивается подбором сечений распределительных труб, в результате чего скорости фильтрации сушильного агента в зоне нагрева и сушки имеют оптимальные величины для каждой из этих зон. Кроме того, при установке регулятора расхода сушильного агента на распределительной трубе имеется возможность регулирования расхода сушильного агента.

С помощью заслонок также возможно регулирование высоты зон нагрева и сушки материала. Переменная по высоте аппарата толщина продуваемого кольцевого слоя также позволяет добиться оптимальных условий нагрева и сушки материала. Слой в зоне нагрева имеет меньшую толщину, чем в зоне сушки, что обеспечивает быстрый прогрев материала перед его сушкой.

Предлагаемые сушильные аппараты могут использоваться для создания многокорпусных и комбинированных сушильных установок (с дополнительным сушильным аппаратом, встроенным в данный сушильный аппарат или выносным). Так, например, дополнительное оснащение сушилок встроенными вихревыми аппаратами позволяет обрабатывать высоковлажные комкующиеся дисперсные материалы.

Для предлагаемых сушильных аппаратов разработана методика расчета на базе математического моделирования и оптимизации процесса сушки материалов с высоким внутридиффузионным сопротивлением в плотном движущемся слое.

Проведенные исследования процесса сушки дисперсных материалов в движущемся плотном поперечно-продуваемом кольцевом слое и результаты оптимизации промышленных сушилок позволили сформулировать следующие принципы конструирования сушильных аппаратов:

1. Вся высоту сушильной камеры целесообразно разделить на зоны: загрузки и формирования слоя материала, предварительного нагрева материала, изотермической сушки, выгрузки сухого материала. Зона загрузки и формирования слоя материала может быть совмещена с зоной предварительного нагрева. Высота зоны предварительного нагрева может быть фиксированной, либо регулируемой. В последнем случае регулированием высоты зоны может достигаться оптимальный режим нагрева конкретного материала.

2. Отработанный по влаге сушильный агент из зоны сушки целесообразно направлять в зону предварительного нагрева материала. Причем, с точки зрения продувки сушильного агента через зоны нагрева и сушки, возможно применять инверсию дутья. В этом случае снижается неравномерность сушки лобового и кормового слоев материала и сокращается время пребывания в зоне сушки.

3. Для выравнивания поля скоростей твердой фазы по высоте сушильной камеры, уменьшения сводообразования и ликвидации застойных зон при выгрузке сухого материала необходимо устанавливать распределительные конуса в зонах загрузки и выгрузки материала.

4. Стенки сушильной камеры могут быть сетчатыми или перфорированными с углом раскрытия  $5^\circ \dots 7^\circ$ , минимальная толщина поперечно-продуваемого кольцевого слоя должна быть не менее 200 мм. Величины углов зон загрузки и выгрузки следует выбирать с учетом угла естественного откоса материала [20].

5. Компоновку малогабаритной сушильной установки следует производить с учетом степени ее мобильности (стационарная или передвижная), оказывающей влияние на наличие и взаиморасположение комплектующего оборудования. Для стационарного исполнения тяго-дутьевое, нагревательное, пылеулавливающее, регенерирующее и охлаждающее оборудование, дополнительный сушильный аппарат могут быть встроенными в сушилку с кольцевой камерой или выносными в зависимости от ограничений на занимаемую производственную площадь. При компоновке передвижной сушильной установки прежде всего необходимо решить вопрос о степени ее полной или частичной (наличие тяго-дутьевого и

греющего оборудования обязательно) комплектности и лишь затем осуществлять выбор конструктивного исполнения. Передвижные сушилки целесообразно устанавливать на поворотной платформе (платформе автомобильного подъемного крана). Высота корпуса аппарата может быть фиксированной или регулируемой (телескопический корпус).

Результаты проведенных экспериментальных исследований, разработанные практические рекомендации по созданию промышленных сушильных аппаратов, алгоритмы математического моделирования и оптимизации могут быть использованы для энергосберегающей оптимизации широкого класса тепло-массообменных аппаратов, применяемых в различных отраслях промышленности и сельского хозяйства.

### **3.4 Математическое описание процессов**

#### **тонкого органического синтеза**

**В качестве объекта компьютерного моделирования рассматривается непрерывный технологический процесс синтеза азокрасителя алого лакокрасочного. Азокрасители получают при последовательном проведении стадий химического синтеза (представляющих жидкофазные сегрегированные процессы тонкого органического синтеза – реакции диазотирования и азосочетания), фильтрования, сушки и диспергирования красителя. Сегрегированные процессы тонкого органического синтеза протекают с сильно различающимися скоростями реакций и осуществляются в емкостных аппаратах большого объема с механическими перемешивающими устройствами), которые в ряде случаев не могут обеспечить достаточной степени однородности полей концентраций, особенно при проведении быстрых химических процессов. Хотя известно, что стадии диазотирования ароматических аминов нитритами щелочных металлов и азосочетания диазосоединений с азосоставляющими являются ключевыми с высоким уровнем потерь дорогостоящего сырья – ароматического амина. Именно эти стадии определяют себестоимость красителей и их качество, определяемое кристаллической структурой пигмента и ее однородностью (степенью дисперсности), а также степенью чистоты красителя.**

**В связи с этим при аппаратурном оформлении технологических процессов и выборе условий синтеза возникает необходимость математического моделирования и расчета на ЭВМ гибких реакторных установок диазотирования и азосочетания, обладающих высокими технико-экономическими показателями и обеспечивающих синтез различных марок азокрасителей с требуемыми потребительскими свойствами.**

#### **3.4.1 Разработка алгоритмов моделирования процессов синтеза азокрасителя алого, осуществляемых в турбулентных трубчатых реакторах цилиндрического и комбинированного типов**

**Обзор литературных данных и результатов экспериментальных исследований, проводимых нами [21 – 25], позволил установить перечень наиболее вероятных реакций, протекающих при синтезе азокрасителей (табл. 3.1, 3.2), кинетические уравнения и константы процессов диазотирования и азосочетания, математические модели этих процессов, осуществляемые в многоступенчатых аппаратах смешения.**

**В меньшей степени были исследованы непрерывные процессы диазотирования и азосочетания, осуществляемых в турбулентных аппаратах трубчатого и комбинированного типов, хотя в последние годы интенсивно развивается новый энерго- и ресурсосберегающий непрерывный способ получения целого ряда химических продуктов с использованием малогабаритных трубчатых турбулентных аппаратов [26 – 29].**

**На рис. 3.24, 3.25 представлены трубчатые турбулентные аппараты, позволяющие осуществлять химические процессы диазотирования и азосочетания в высокотурбулентных потоках.**



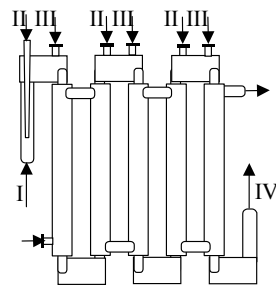
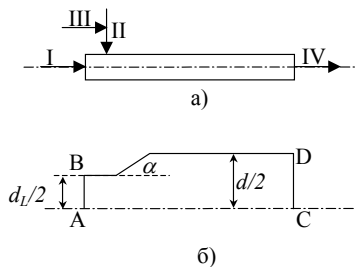


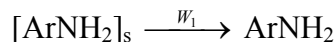
Рис. 3.24 Малогабаритный турбулентный трубчатый реактор:  
**а** – цилиндрического типа;  
**б** – диффузор-конфузорного типа:  $d_L$  – диаметр диффузора;  
 $d$  – диаметр конфузора

Рис. 3.25 Турбулентный трубчатый реактор комбинированного типа:  
**I, II, III, IV** – потоки веществ

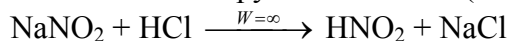
### 3.1 Перечень наиболее вероятных реакций, протекающих при диазотировании ароматических аминов нитритом натрия, и уравнения кинетики процесса диазотирования

#### Диазотирование (реакция экзотермическая)

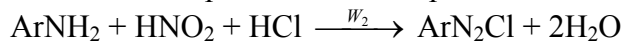
растворение твердой фазы амина в среде соляной кислоты



образование диазотирующего агента ( $\text{HNO}_2$ )



целевая реакция диазотирования



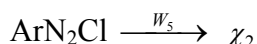
разложение азотистой кислоты



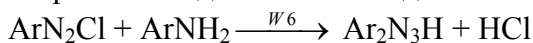
образование диазосмол



разложение диазосоединения с образованием диазосмол



образование диазоаминосоединений



#### Уравнения кинетики и кинетические константы процесса диазотирования

Кинетическое уравнение	Порядок реакции	Предэкспоненциальный множитель, $(\text{м}^3)^{n-1}/\text{моль}^{n-1}/\text{с}$	Энергия активации, Дж/моль
$W_2 = k_2[\text{ArNH}_2][\text{HNO}_2]$	2	$3,75 \cdot 10^5$	$46,82 \cdot 10^3$
$W_3 = k_3[\text{HNO}_2]^4/P_{\text{NO}}^2$	4	$7,17 \cdot 10^{21}/(9,81 \cdot 10^4)^2$	$119,65 \cdot 10^3$
$W_4 = k_4[\text{ArN}_2\text{Cl}][\text{HNO}_2]$	2	$0,32 \cdot 10^5$	$63,69 \cdot 10^3$

$W_5 = k_5 [\text{ArN}_2\text{Cl}]$	1	$1,10 \cdot 10^{10}$	$87,15 \cdot 10^3$
-------------------------------------	---	----------------------	--------------------

Обозначения:

$A$  –  $\text{ArNH}_2$  (амин);  $AK$  –  $\text{HNO}_2$ ;  $CK$  –  $\text{HCl}$ ;  $\sigma$  –  $\text{NO}$ ;  $D$  –  $\text{ArN}_2\text{Cl}$  (диазосоединение);  $\chi = (\chi_1, \chi_2)$ ;  $P_{\text{NO}}$  – парциальное давление нитрозных газов;  $r$  – радиус частицы амина;  $l$  – текущая координата длины реактора;  $c_A^*$  – равновесная концентрация амина;  $\rho_A, M_A$  – плотность и молекулярная масса амина;  $\hat{\psi}(r, l)$  – ненормированная плотность распределения числа  $N$  частиц амина по размеру, т.е.  $\hat{\psi} = dN/dr$ ;  $G_l, G_s, G_N$  – расходы жидкой и твердой фаз суспензии амина и нитрита натрия;  $S_{\text{тр}}$  – площадь поперечного сечения трубы реактора;  $c_p$  – теплоемкость;  $v$  – скорость потока;  $K$  – коэффициент теплопередачи;  $h$  – тепловой эффект реакции; индексы: (0) – вход в реактор; х – хладагент; (i) – точка распределенного по длине ввода реагентов в реактор.

### 3.2 Перечень наиболее вероятных реакций, протекающих при синтезе азопигментов и кинетические уравнения процесса азосочетания

<i>Азосочетание</i>
<b>Целевая реакция получения азопигмента</b>
$\text{ArN}_2\text{Cl} + \text{RO-Y} \xrightarrow{W_1} \text{ArN}_2\text{RO} + \text{Y}^+ + \text{Cl}^-$ ,
<b>Разложение диазосоединения с получением диазосмол</b>
$\text{ArN}_2\text{Cl} \xrightarrow{W_2} \chi$
<b>Кристаллизация азопигмента</b>
$\text{ArN}_2\text{RO} \xrightarrow{W_3} [\text{ArN}_2\text{RO}]_s$

### Кинетические уравнения и константы процесса азосочетания

Кинетическое уравнение	Значения констант
$I = k_I (c_{\text{п}} - c_{\text{п}}^*)^{N_I}$	$k_I = 0,983 \cdot 10^{23} \text{ м}^{13,5} / \text{кг}^{5,5} / \text{с};$ $N_I = 5,5$
$\eta(c_{\text{п}}) = 1 / (\eta_{\text{к}}^{-1} + \eta_{\text{д}}^{-1}),$ $\eta_{\text{к}} = k_{\text{к}} (c_{\text{п}} - c_{\text{п}}^*)^{N_{\text{к}}},$ $\eta_{\text{д}} = D(c_{\text{п}} - c_{\text{п}}^*) / (\rho_{\text{п}} r),$	$k_{\text{к}} = 1,91 \cdot 10^{-5} \text{ м}^{6,5} / \text{кг}^{1,82} / \text{с};$ $N_I = 1,82$ $A = D / \rho_{\text{п}} = 5,81 \cdot 10^{-14} \text{ м}^2 / \text{с}$
$W_1 = \frac{k_1^0 [\text{ArN}_2\text{Cl}][\text{R-Y}]}{(1 + k_w / (k_b [H^+]) + k_a k_w / (k_b [H^+]^2))} \times \frac{1}{1 + [H^+] / k_p}$	$k_c^0 = 1,87 \cdot 10^2 \text{ м}^3 / (\text{моль} \cdot \text{с})$ $k_a = 7,6 \cdot 10^{-6}; k_b = 1,8 \cdot 10^{-2};$ $k_p = 2,08 \cdot 10^{-8}; k_w = 6,3 \cdot 10^{-11}$

$W_2 = k_2(pH) c_D^{n_2(pH)}$	$\lg k_2 = \begin{cases} -5,897 + 0,428pH, & pH < 7 \\ -19,86 + 4,428pH - 0,286pH^2 - 4,75 \cdot 10^{-4} pH^3, & 7 \leq pH \leq 9,5 \\ 5,504 - pH, & pH > 9,5 \end{cases}$ $N_2 = \begin{cases} 1, & pH < 7 \\ 0,4 - 3,32 \cdot 10^{-3} pH^2 + 2,21 \cdot 10^{-3} pH^3, & 7 \leq pH \leq 9,5 \\ 2, & pH > 9,5 \end{cases}$
-------------------------------	--

Обозначения:  $D - ArN_2Cl$ ,  $Az - (R - Y)$ ,  $c_d, c_{Az}$  - концентрации диазо- и азосоставляющих;  $c_p, c_p^*$  - текущая и равновесная концентрации пигмента;  $[H^+]$  - концентрации ионов водорода;  $k_W$  - ионное произведение;  $k_a, k_b, k_p$  - константы кислотно-основных равновесий;  $I, \eta_d, \eta_k$  - скорости образования и роста кристаллов пигмента в диффузионной и кинетической областях;  $f(r)$  - плотность распределения поверхности кристаллов пигмента по их размерам;  $D$  - коэффициент диффузии (рассчитывается по уравнению Эйнштейна-Смолуховского).

Такие аппараты весьма эффективны как для проведения быстрых химических процессов, так и для интенсивного смешения с целью гомогенизации жидкости. Они успешно используются в качестве смесителей (для получения целевого продукта), предреакторов (для приготовления исходной реакционной смеси), малогабаритных реакторов (для проведения быстрых химических реакций), а также осуществления массообменных процессов [30 – 33].

*Математическое описание процесса диазотирования, осуществляемого в турбулентных аппаратах трубчатого типа.*

Основными элементами (модулями) турбулентных аппаратов трубчатого типа являются смеситель на входе в трубчатый аппарат, реактор цилиндрического типа, диффузор-конфузор и камеры смешения в аппарате комбинированного типа. Таким образом, для моделирования процесса диазотирования необходимо учесть процессы: 1) смешения дозируемых в аппарат компонентов в камере смешения, установленной на входе в аппарат; 2) химического взаимодействия в трубчатой части аппарата; 3) изменения условий протекания элементарных процессов химического взаимодействия при наличии в аппарате устройства турбулизации потока (диффузор-конфузора); 4) химического взаимодействия в камерах смешения в аппаратах комбинированного типа.

Рассмотрим основные этапы построения математической модели процесса диазотирования, осуществляемого в турбулентных аппаратах трубчатого типа в среде сильной минеральной кислоты (соляной, серной и др.). Исходное сырье – ароматический амин – непрерывно подается в реактор в виде солянокислой суспензии. Одновременно в реактор вводится водный раствор нитрита натрия, подача которого может распределяться по длине трубчатой части реактора или по секциям комбинированного реактора (рис. 3.24, 3.25).

Работоспособность трубчатого реактора определяется условиями обеспечения заданной производительности аппарата, неосаждения твердой фазы амина в вертикальных трубах и турбулентности гидродинамического режима течения в трубе. Основными параметрами, определяющими эти условия, являются диаметр трубы реактора и концентрация амина в питании реактора.

Допустимый диаметр трубы реактора по условию неосаждения агрегатов твердой фазы амина определяется как

$$d \leq d_{кр}^I,$$

где  $d_{кр}^I$  – первый критический диаметр трубы реактора рассчитывается по формуле

$$d_{кр}^I = \frac{Re \bar{\mu}_c}{K v_{ос} \bar{\rho}_c}, \quad (3.63)$$

где  $\bar{\mu}_c$  – средний динамический коэффициент вязкости суспензии,  $v_{ос}$  – скорость осаждения агрегатов амина,  $\bar{\rho}_c$  – средняя плотность суспензии,  $K = v_n / v_{ос}$ ,  $v_n$  – скорость потока.

Средняя плотность суспензии при заданной плотности твердой фазы  $\rho_T$  и массовая доля кислоты в водном растворе  $\bar{X}_{СК}$  рассчитываются по формулам:

$$\bar{\rho}_c = \frac{1}{\frac{\bar{X}_T}{\rho_T} + \frac{1 - \bar{X}_T}{\bar{\rho}}}; \quad \bar{\rho} = \frac{1}{\frac{\bar{X}_{CK}}{\rho_{CK}} + \frac{1 - \bar{X}_{CK}}{\bar{\rho}_B}}; \quad (3.6)$$

$$X_{CK} = \frac{C_{CK} M_{CK}}{(1 - \varphi) \bar{\rho}}; \quad \varphi = \frac{C_A^{(0)} M_A}{\rho_T}.$$

где  $\bar{X}_{CK}$ ,  $\bar{X}_T$  – массовые доли концентрированной соляной кислоты в растворе и твердой фазы амина в суспензии,  $\rho_T$ ,  $\rho_{CK}$ ,  $\rho_B$  – плотности твердой фазы амина, концентрированной соляной кислоты и воды соответственно,  $c_A^{(0)}$ ,  $c_{CK} = 2,5c_A^{(0)}$  – концентрация амина и соляной кислоты в суспензии на входе в реактор.

Из условий надежной работы клапанов и насосов, питающих реактор, концентрация амина в суспензии на входе в реактор не должна превышать  $800 \text{ моль/м}^3$ . Отсюда максимальная объемная доля твердой фазы амина в суспензии будет равна  $\varphi = 8,4\%$ , и этому значению  $\varphi$  соответствует следующая формула для расчета вязкости суспензии:

$$\bar{\mu}_c = \bar{\mu}(1 + 2,5\varphi), \quad (3.6)$$

где  $\bar{\mu}_c = \frac{1}{\frac{X_{CK}}{\mu_{CK}} + \frac{1 - X_{CK}}{\mu_B}}$ ,  $\bar{\mu}$ ,  $\mu_{CK}$ ,  $\mu_B$  – средние динамические коэффициенты вязкости жидкой фазы, соляной кислоты и воды соответственно.

Среднюю скорость свободного осаждения твердой фазы можно рассчитать по формуле

$$v_{oc} = 5,46 \sqrt{\frac{d_T^{\max} (\rho_T - \bar{\rho})}{\bar{\rho}}}. \quad (3.66)$$

После подстановки формул (3.64) – (3.66) в выражение (3.63) получим, что  $d_{кр}^I$  зависит от концентрации амина в суспензии на входе в реактор, т.е.

$$d_{кр}^I = f(c_A^{(0)}). \quad (3.67)$$

Вторым условием работоспособности реактора диазотирования является обеспечение турбулентного режима течения суспензии амина –  $Re = 10^4$ . Определяемый с учетом этого условия диаметр будем находить из следующего выражения:

$$d_{кр}^{II} = \frac{4G_l^{(0)} \bar{\rho}_c}{\pi Re \bar{\mu}_c},$$

где  $d_{кр}^{II}$  – второй критический диаметр труб реактора;  $G_l^{(0)}$  – расход жидкой фазы на входе в реактор.

Общий расход солянокислой суспензии амина в питании реактора определяется из уравнений материального баланса по стадиям технологического процесса получения азокрасителей

$$G_l^{(0)} = \frac{Q \cdot 10^6}{c_A^{(0)} T_{эф} K_D K_{Az} M_{\Pi}},$$

где  $K_D$ ,  $K_{Az}$ ,  $T_{эф}$  – выходы по стадиям диазотирования, азосочетания и эффективный фонд рабочего времени реакторной установки синтеза азопигментов, соответственно.

Диаметр  $d_{кр}^{II}$  зависит от концентрации амина в питании реактора и производительности

$$d_{кр}^{II} = f(c_A^{(0)}, Q), \quad (3.68)$$

где  $Q$  – производительность реактора по пигменту.

На рис. 3.26 представлены графики, соответствующие уравнениям (3.67) и (3.68), из которых видно, что при производительности меньше  $1000 \text{ т/год}$  (для примера был взят пигмент алый лакокрасочный) диаметр трубы реактора определяется условием турбулентности.

Задаваясь максимально возможным диаметром трубы реактора ( $\sim 40 \text{ мм}$ ), можно определить максимальную концентрацию амина  $c_A^{(0)}$  в питании реактора. Минимальную концентрацию ами-

на можно определить по точке перегиба кривой для каждой производительности  $Q$  (рис. 3.26). Соответственно такими концентрациями будут:

- для производительности 500 т/год  $c_A^{(0)} \in [130, 210]$  моль/м<sup>3</sup>;
- для производительности 1000 т/год  $c_A^{(0)} \in [280, 410]$  моль/м<sup>3</sup>.

На рис. 3.27 представлены графики зависимости среднего времени пребывания реакционной смеси  $t$  от концентрации амина  $c_A^{(0)}$ . Их анализ показывает, что при производительности больше 1000 т/год и концентрации амина не более 100 моль/м<sup>3</sup> время пребывания будет расти, так как определяющим условием при этом является неосаждение твердой фазы амина (рис. 3.26). При концентрациях больше 100 моль/м<sup>3</sup> и  $Q > 1000$  т/год диаметр реактора определяется только из условий турбулентности реакционного потока и существенно зависит от изменения концентрации амина, что вызывает большее изменение объема реактора, нежели расхода суспензии на входе в реактор. При  $Q < 1000$  т/год среднее время пребывания при всех концентрациях падает. Только при очень больших концентрациях (700 ... 800) моль/м<sup>3</sup> влияние на время пребывания расхода суспензии и объема реактора становится равнозначным.

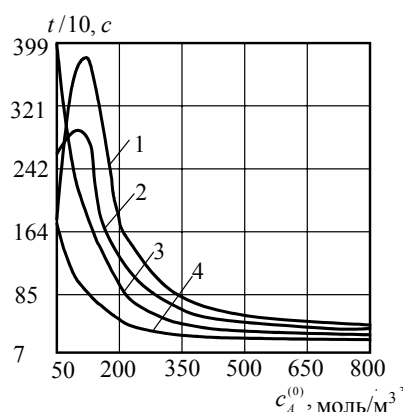
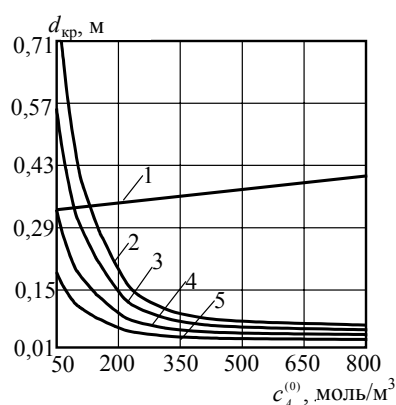


Рис. 3.26 Зависимость критических диаметров трубы реактора, определяемых из условий его работоспособности, от концентрации амина на входе в реактор:

$$1 - d_{кр}^I = f(c_A^{(0)});$$

$$2, 3, 4, 5 - d_{кр}^I = f(c_A^{(0)}, Q);$$

$$2 - Q = 2000 \text{ т/год};$$

$$3 - Q = 1500 \text{ т/год};$$

$$4 - Q = 1000 \text{ т/год};$$

$$5 - Q = 500 \text{ т/год}$$

Рис. 3.27 Влияние концентрации амина на входе в реактор на пре-бывания реакционной смеси  $t - c_A^{(0)}$ :

$$1 - Q = 2000 \text{ т/год};$$

$$2 - Q = 1500 \text{ т/год};$$

$$3 - Q = 1000 \text{ т/год};$$

$$4 - Q = 500 \text{ т/год}$$

В производственных условиях диаметр трубы реактора постоянен и при необходимости увеличения производительности  $Q$  можно наращивать его длину. Этого результата можно добиться и технологическим приемом, повышая концентрацию твердой фазы амина с целью снижения расхода солянокислой суспензии амина в питании реактора. Для увеличения концентрации амина без нарушения условий работоспособности реактора необходимо выбрать такой диаметр трубы (рис. 3.26), которому будет соответствовать максимально возможный интервал допустимых концентраций амина для выбранной производительности. Такому условию соответствует диаметр трубы, равный 40 мм.

Вторым важным достоинством применения реактора с максимальным диаметром (40 мм) является возможность его использования в малотоннажных производствах, так как при больших диаметрах не будет выполняться условие турбулентности реакционной смеси.

На рис. 3.28 представлен интервал допустимых значений концентраций амина на входе в реактор. По данной области определяются минимально и максимально возможные значения концентраций амина при различных производительностях установки по пигменту. На практике

концентрация амина будет изменяться около номинального значения, ориентировочно, в пределах  $\pm 2,5\%$ . В связи с этим на рис. 3.28 изображена допустимая область значений концентраций амина, ограниченная кривыми  $c_{A \max}^{(0)} = f(Q)/0,975$  и  $c_{A \max}^{(0)} = f(Q)/1,025$  (допустимая область заштрихована).

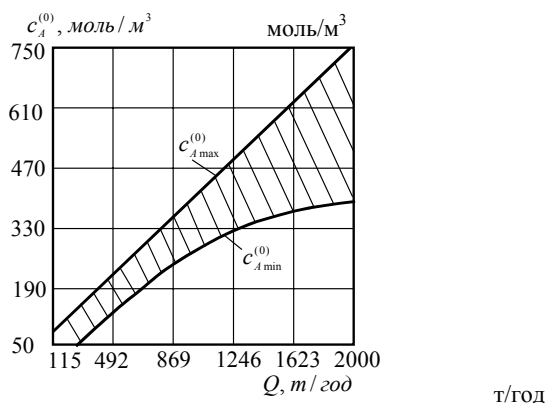


Рис. 3.28 Допустимая область концентрации амина на входе в реактор

Минимально возможная производительность трубчатого реактора по пигменту, при которой выполняются условия неосаждения твердой фазы амина и турбулентности реакционной среды, равна 115 т/год. При меньших производительностях необходимо использовать реактор периодического действия или реактор смешения типа "царга-тарелка".

Придем к построению математической модели непрерывного процесса diazotирования, осуществляемого в трубчатом реакторе. Схема материальных потоков в одной секции трубчатого реактора приведена на рис. 3.29.

При составлении уравнений математической модели примем следующие допущения: 1) гидродинамические режимы течения реакционной смеси и хладагента близки к режиму идеального вытеснения; 2) реактор является объектом с распределенными только по длине  $l$  координатами, скорость потока  $v_{\pi}(l) = \text{const}$ ; 3) потери тепла в окружающую среду пренебрежимо малы; 4) теплофизические характеристики принимаются постоянными в рабочем диапазоне температур; 5) кристаллы амина будем считать сферическими частицами; 6) реакция diazotирования происходит в растворе.

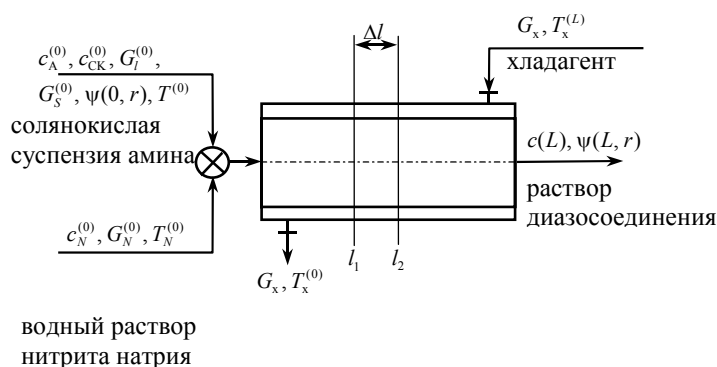


Рис. 3.29 Схема материальных потоков в трубчатом реакторе diazotирования:

$\psi(r)$  – гранулометрический состав; х – хладагент;  $l$  – жидкая фаза;  $s$  – твердая фаза;  $\sigma, \chi$  – нитрозные газы и diazosмолы, соответственно

С учетом принятых обозначений и допущений составим уравнения материального покомпонентного баланса на участке трубы  $(l_1, l_2)$  за промежуток времени  $(t_1, t_2)$  например, по растворенному амину:

$$G_l \int_{t_1}^{t_2} [c_A(l_2) - c_A(l_1)] dt + S \int_{l_1}^{l_2} \left[ W_2(c_A, c_{AK}, T) - \frac{1}{M_A} \int_0^\infty \hat{\psi}(\xi, r) W_1(c_A, T) dr \right] d\xi dt = \\ = S \int_{l_1}^{l_2} [C_A(\xi, t_2) - C_A(\xi, t_1)] d\xi.$$

Пользуясь теоремой о среднем, получим равенство:

$$G_l [c_A(l_2) - c_A(l_1)] \Big|_{t=t_3} \Delta t + S \left[ W_2(c_A, c_{AK}, T) - \frac{1}{M_A} \int_0^\infty \hat{\psi}(\xi, r) W_1(c_A, T) dr \right] \Big|_{\xi=l_4}^{\xi=l_4} \Delta \Delta t = \\ = S [C_A(\xi, t_2) - C_A(\xi, t_1)] \Big|_{\xi=l_3} \Delta l,$$

которое при помощи теоремы о конечных приращениях можно преобразовать к виду:

$$G_l \frac{\partial c_A(l, t)}{\partial l} \Big|_{l=l_3}^{l=l_2} \Delta l \Delta t + S \left[ W_2(c_A, c_{AK}, T) - \frac{1}{M_A} \int_0^\infty \hat{\psi}(\xi, r) W_1(c_A, T) dr \right] \Big|_{\xi=l_4}^{\xi=l_4} \Delta \Delta t = \\ S \frac{\partial c_A(l, t)}{\partial t} \Big|_{t=t_3}^{t=t_2} \Delta l \Delta t.$$

Переходя к пределу при  $l_1, l_2 \rightarrow l$  и  $t_1, t_2 \rightarrow t$ , получим уравнение

$$v \frac{\partial c_A}{\partial l} + W_2(c_A, c_{AK}, T) - \frac{1}{M_A} \int_0^\infty \hat{\psi}(l, r) W_1(c_A, T) dr = \frac{\partial c}{\partial t}; \quad (3.6)$$

$$c_a(l, 0) = c_a^l(l); \quad c_a(0, t) = c_a^0(t).$$

Аналогичным образом можно получить уравнения динамики трубчатого реактора и для других компонентов реакционной смеси:

**по азотистой кислоте (AK):**

$$v \frac{\partial c_{AK}}{\partial l} + W_2(c_a, c_{AK}, T) + W_3(c_{AK}, T) + W_4(c_{AK}, c_D, T) = \frac{\partial c_{AK}}{\partial t}; \quad (3.70)$$

$$c_{AK}(l, 0) = c_{AK}^l(l); \quad c_{AK}(0, t) = c_N G_N^{(0)}(t) / G_l^{(0)}(t);$$

**по диазосоединению (D):**

$$v \frac{\partial c_D}{\partial l} - W_2(c_A, c_{AK}, T) + W_4(c_{AK}, c_D, T) + W_5(c_D, T) = \frac{\partial c_D}{\partial t}; \quad (3.71)$$

$$c_D(l, 0) = c_D^0(l); \quad c_D(0, t) = c_D^0(t);$$

**по продуктам разложения  $(\sigma, \chi)$ :**

$$v \frac{\partial c_\sigma}{\partial l} - W_3(c_{AK}, T) = \frac{\partial c_\sigma}{\partial t}; \quad c_\sigma(l, 0) = c_\sigma^0(l); \quad c_\sigma(0, t) = c_\sigma^0(t); \quad (3.72)$$

$$v \frac{\partial c_\chi}{\partial l} - W_4(c_{AK}, c_D, T) - W_5(c_D, T) = \frac{\partial c_\chi}{\partial t}; \quad (3.73)$$

$$c_\chi(l, 0) = c_\chi^0(l); \quad c_\chi(0, t) = c_\chi^0(t).$$

Составим теперь уравнение динамики для фракции частиц амина, характеризующихся размером от  $r$  до  $r + dr$  на участке трубы  $(l_1, l_2)$  за время  $(t_1, t_2)$ :

$$\begin{aligned}
& \int_{t_1}^{t_2} [N(l_2, t)\psi(l_2, t, r)dr - N(l_1, t)\psi(l_1, t, r)dr]dt + \\
& + \frac{1}{v} \int_{t_1}^{t_2} \int_{l_1}^{l_2} N(\xi, t) [\psi(\xi, t, r)W_1^{(r)}(\xi, t, r) - \psi(\xi, t, r+dr)W_1^{(r)}(\xi, t, r+dr)] = \\
& = \frac{1}{v} \int_{l_1}^{l_2} [N(\xi, t_2)\psi(\xi, t_2, r)dr - N(\xi, t_1)\psi(\xi, t_1, r)dr]d\xi,
\end{aligned}$$

которое с использованием приведенной выше техники можно преобразовать к уравнению вида:

$$v \frac{\partial \psi(l, t, r)}{\partial l} - \frac{\partial}{\partial r} [\hat{\psi}(l, t, r)W_1^{(r)}(l, t, r)] = \frac{\partial \psi(l, t, r)}{\partial t}; \quad (3.74)$$

$$\hat{\psi}(0, t, r) = \hat{\psi}^{(0)}(t, r); \quad \hat{\psi}(l, 0, r) = \hat{\psi}^{(0)}(l, r).$$

Получим теперь уравнения динамики теплообмена в трубчатом реакторе по реакционной смеси:

$$\begin{aligned}
c_p \rho \int_{t_1}^{t_2} [T(l_2, t) - T(l_1, t)]dt + \int_{t_1}^{t_2} \int_{l_1}^{l_2} [-hSW_2(\xi, t) + K_1\pi D[T(\xi, t) - T_x(\xi, t)]]d\xi dt = \\
= c_p \rho S \int_{l_1}^{l_2} [T(\xi, t_2) - T(\xi, t_1)]d\xi;
\end{aligned}$$

по хладагенту (х):

$$\begin{aligned}
c_p^x \rho_x G_x \int_{t_1}^{t_2} [T_x(l_2, t) - T_x(l_1, t)]dt - \int_{t_1}^{t_2} \int_{l_1}^{l_2} [K_1\pi D[T(\xi, t) - T_x(\xi, t)]]d\xi dt = \\
= c_p^x \rho_x S_p \int_{l_1}^{l_2} [T(\xi, t_2) - T_x(\xi, t_1)]d\xi.
\end{aligned}$$

Проводя рассуждения аналогичные предыдущим, получим уравнения:

$$c_p \rho G_l \frac{\partial T(l, t)}{\partial l} - hSW_2(l, t) + K_1\pi D[T(l, t) - T_x(l, t)] = c_p \rho S \frac{\partial T(l, t)}{\partial t}; \quad (3.75)$$

$$T(l, 0) = T^0(l); \quad T(0, t) = T^0(t);$$

$$c_p^x \rho_x G_x \frac{\partial T_x(l, t)}{\partial l} - K_1\pi D[T(l, t) - T_x(l, t)] = c_p^x \rho_x S_p \frac{\partial T_x(l, t)}{\partial t}; \quad (3.76)$$

$$T_x(l, 0) = T_x^0(l); \quad T_x(0, t) = T_x^L(t);$$

Таким образом, уравнения динамики непрерывного процесса diaзотирования в трубчатом реакторе представляют собой нелинейные дифференциальные уравнения в частных производных первого порядка, для решения которых можно использовать метод характеристик или конечно-разностные методы [33].

Уравнения статики легко получить из выведенной системы уравнений динамики приравниванием нулю производной по времени, т.е.

$$\frac{\partial c}{\partial t} = 0; \quad \frac{\partial T}{\partial t} = 0; \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0.$$

Математическая модель статики процесса diaзотирования, осуществляемого в трубчатом реакторе, представляет собой систему нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений (3.69) – (3.76).

Наибольшую сложность при решении системы дифференциальных уравнений, описывающих статические режимы diaзотирования, представляет уравнение, описывающее гранулометрический состав твердой фазы амина в  $l$ -ом сечении трубчатого реактора



$$\vartheta \frac{\partial \hat{\psi}(l, r)}{\partial l} = \frac{\partial}{\partial r} \left[ \hat{\psi}(l, r) W_1^{(r)}(l, r) \right] \quad (3.77)$$

$$\hat{\psi}(0, r) = \hat{\psi}^{(0)}(r).$$

В случае линейного уравнения кинетики растворения частицы амина [138]

$$\frac{dr}{dt} = -A r^{-\alpha} \exp(-E_1 / RT) (c_A^* - c_A) / \rho_A, \quad (3.78)$$

где  $A, \alpha$  - кинетические константы;  $c_A^*, c_A$  - равновесная и текущая концентрации амина;  $\rho_A$  - плотность амина.

Решение уравнения (3.15) может быть получено методом характеристик в аналитическом виде [33]. Решение уравнения (3.78) запишем в виде

$$r(l) = f(r_0, l) = \left[ r_0^{\alpha+1} - (1+\alpha) \frac{\int_0^l A \exp(-E_1 / RT) (c_A^* - c_A) d\tilde{l}}{\rho_A \cdot \vartheta} \right]^{\frac{1}{1+\alpha}},$$

откуда можно рассчитать начальный радиус  $r_0$  частицы по формуле

$$r_0 = f_1(r, l) = \left[ r^{\alpha+1} + (1+\alpha) \frac{\int_0^l A \exp(-E_1 / RT) (c_A^* - c_A) d\tilde{l}}{\rho_A \cdot \vartheta} \right]^{\frac{1}{1+\alpha}}.$$

В этом случае решение уравнения (3.77) с начальным условием может быть записано в следующем виде [33]:

$$\hat{\psi}(r, l) = \hat{\psi}^{(0)}(f_1(r, l)) \exp \left[ \int_0^l \frac{\partial W_1^{(r)}}{\partial r} [r(\tilde{l}, f_1(r, \tilde{l}))] d\tilde{l} \right], \quad (3.79)$$

В случае нелинейного уравнения кинетики растворения частицы, например, в виде

$$\frac{dm}{dt} = -\beta^* (c_A^* - c_A) S,$$

где  $\beta$  - эффективный коэффициент массоотдачи;  $S$  - поверхность частицы, необходимо использовать численный алгоритм решения уравнения (3.77). Аппроксимируя дифференциальные уравнения в частных производных (3.77) конечной системой дифференциальных уравнений в обычных производных с использованием конечно-разностной схемы первого порядка, получим

$$\frac{d\hat{\psi}_i}{dl} = W_1^{(r)} \left( \frac{r_i + r_{i-1}}{2}, c_A, c_{AK} \right) \left[ \frac{\hat{\psi}_i - \hat{\psi}_{i-1}}{\Delta r_i} \right] - \frac{\partial W_1^{(r)}}{\partial r} (r_i, c_A, c_{AK}) \psi_i,$$

$$\hat{\psi}_1(0) = \hat{\psi}^{(0)}(r_i, l), \Delta r_i - \text{шаг сетки.} \quad (3.80)$$

Полученная система обыкновенных дифференциальных уравнений (3.80) одновременно с другими уравнениями модели может быть решена каким-либо численным методом. При этом могут возникнуть сложности, поскольку в начальной фазе процесса диазотирования скорость растворения твердой фазы и скорость реакции диазотирования различаются на несколько порядков, т.е. система дифференциальных уравнений математической модели процесса диазотирования является жесткой. В этом случае явные методы Рунге-Кутты исключаются из рассмотрения.

Для решения системы дифференциальных уравнений модели статки процесса диазотирования мы применяли два метода: неявный метод трапеций [34] и метод Дормана-Принса 5-го порядка

точности с автоматическим выбором шага [35], которые дают вполне сопоставимые результаты и обеспечивают получение решения с заданной точностью.

Математическая модель динамики процесса диазотирования, осуществляемого в турбулентном трубчатом аппарате, включает нелинейные дифференциальные уравнения с частными производными (3.69) – (3.76), для решения которых использовали конечно-разностный метод [11].

Для математического описания процесса диазотирования, осуществляемого в турбулентном трубчатом реакторе комбинированного типа, необходимо к уравнениям (3.69) – (3.76) добавить уравнения, описывающие протекание процесса диазотирования в камере смешения [23].

#### *Математическое описание процесса азосочетания*

При моделировании процесса азосочетания примем следующие допущения: 1) собственно реакция азосочетания протекает в растворе; 2) влияние изменения температуры вследствие экзотермической реакции на протекание химических процессов внутри модулей считается несущественным; 3) расчет гранулометрического распределения кристаллов азопигментов состоит в вычислении дискретных значений числа кристаллов, принадлежащих тому или иному диапазону размеров из всего возможного интервала изменения размеров кристаллов, определяемого по экспертным оценкам; 4) кислотность среды сочетания, обеспечивается на практике подачей в аппарат раствора углекислого натрия (сода); 5) учет расходов нейтрализующего агента и воды в питании модуля осуществляется путем пересчета общего расхода потока реакционной среды в реакторной системе.

Как показали экспериментальные исследования, одинаковое время пребывания частиц в трубчатом реакторе обеспечивается при развитом турбулентном режиме течения потока, который достигается при значениях Рейнольдса  $Re > 10\ 000$ . При этом длина трубчатой части реактора определяется необходимым временем пребывания в нем реакционной массы и роста кристаллов пигмента.

Процесс азосочетания, осуществляемый в турбулентном трубчатом реакторе, описывается вектором концентраций взаимодействующих компонентов  $\vec{c}(l, t)$  и гранулометрическим составом  $f(r, l, t)$  кристаллов пигмента. Проводя рассуждения аналогичные рассуждениям при выводе модели диазотирования и учитывая, что в результате реакции протекает процесс кристаллизации пигмента уравнения покомпонентного материального баланса при допущении идеального вытеснения вдоль оси реактора можно записать в следующем виде:

*по азосоставляющей (Az):*

$$V \frac{\partial c_{Az}}{\partial l} + W_{Az}(c_{Az}, c_D, pH) = \frac{\partial c_{Az}}{\partial t}; \quad (3.81)$$

$$c_{Az}(0, t) = c_{Az}^{(0)};$$

*по диазосоставляющей (D):*

$$\vartheta \frac{\partial c_D}{\partial l} + W_{Az}(c_{Az}, c_D, pH) + W_p(c_D, pH) = \frac{\partial c_D}{\partial t}; \quad (3.82)$$

$$c_D(0, t) = c_D^{(0)};$$

*по продуктам разложения ( $\chi$ ) диазосоединения:*

$$\vartheta \frac{\partial c_\chi}{\partial l} - W_p(c_D, pH) = \frac{\partial c_\chi}{\partial t}; \quad (3.83)$$

$$c_\chi(0, t) = c_\chi^{(0)};$$

*по пигменту в жидкой фазе:*

$$\vartheta \frac{\partial c_\Pi}{\partial l} - W_{Az}(c_{Az}, c_D, pH) + W_{кр}(c_\Pi) = \frac{\partial c_\Pi}{\partial t}; \quad (3.84)$$

$$c_\Pi(0, t) = 0;$$

где  $l$  – текущая длина;  $\vartheta$  – линейная скорость движения потока реакционной массы;  $c_{Az}, c_D, c_\chi, c_\Pi$  – концентрации азосоставляющей, диазосоставляющей, продуктов разложения диазосоединения (диазосмол) и пигмента в жидкой фазе, соответственно;  $W_{кр}$  – скорость перехода пигмента из жидкой фазы в твердую в результате кристаллизации.

*По твердой фазе пигмента:*

$$9 \frac{\partial \hat{f}(l, t, r)}{\partial l} - \frac{\partial}{\partial r} [\hat{f}(l, t, r) \eta(l, t, r)] = \frac{\partial \hat{f}(l, t, r)}{\partial t}; \quad (3.85)$$

$$\hat{f}(0, t, r) = \hat{f}^{(0)}(t, r); \quad \hat{f}(l, 0, r) = \hat{f}^{(0)}(l, r).$$

Уравнения статики процесса азосочетания можно получить из записанной выше системы дифференциальных уравнений приравнивая нулю производные по времени. Математическая модель статики процесса азосочетания, осуществляемого в турбулентном трубчатом реакторе, представляет собой систему нелинейных дифференциальных уравнений в обыкновенных производных (за исключением дифференциального уравнения в частных производных (3.85)). Уравнение (3.85) является нелинейным, так как скорость роста кристаллов пигмента алого описывается нелинейным уравнением вида [24]:

$$\frac{dr}{dt} = \eta(c_{II}) = \frac{1}{(\eta_K^{-1} + \eta_D^{-1})},$$

$$\eta_K = k_K (c_{II} - c_{II}^*)^{N_K} = 1,91 \cdot 10^{-5} \cdot (c_{II} - c_{II}^*)^{1,82},$$

$$\eta_D = D(c_{II} - c_{II}^*) / (\rho_{II} \cdot r) = 5,81 \cdot 10^{-14} \cdot (c_{II} - c_{II}^*) / r,$$

где  $c_{II}, c_{II}^*$  – текущая и равновесная концентрация пигмента в растворе;  $D$  – коэффициент диффузии;  $\rho_{II}$  – плотность пигмента;  $\eta_K, \eta_D$  – скорости роста кристаллов в диффузионной и кинетической областях.

В связи с этим аппроксимируем дифференциальное уравнение в частных производных конечной системой дифференциальных уравнений в обыкновенных производных с использованием конечно-разностной схемы первого порядка (аналогичной 3.80).

Полученная таким образом система нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающая статические режимы азосочетания в турбулентном трубчатом реакторе, может быть решена стандартными численными методами. Однако и в этом случае могут возникнуть трудности, связанные с явлением "жесткости", что предопределяет использование неявных методов интегрирования: метода трапеций [341] и метода Дормана-Принса 5 порядка точности.

Математическая модель динамики процесса азосочетания, осуществляемого в турбулентном трубчатом реакторе, включает нелинейные дифференциальные уравнения с частными производными (3.81) – (3.85), для решения которых применяли конечно-разностный метод [11].

Экспериментальные исследования процесса азосочетания показали, что осуществление процесса азосочетания при синтезе пигментов с высокой точностью обеспечивается в турбулентных реакторах цилиндрического типа, горизонтального типа. Это обстоятельство позволило нам отказаться от исследования процесса азосочетания в более сложном трубчатом аппарате комбинированного типа.

#### *Алгоритм компьютерного моделирования процессов диазотирования и азосочетания*

Рассмотрим алгоритм математического моделирования процессов диазотирования и азосочетания при синтезе алопигмента алого (см. блок-схему на рис. 3.23).

В блоке 1 осуществляется задание облика реактора, указывается конструктивное оформление и число унифицированных модулей реакторов, задаются конструктивные размеры модулей и всего аппарата.

В блоках 3а, б, в и 4 в зависимости от выбранного типа модулей формируются управляющие параметры программы расчета статических и динамических режимов процессов диазотирования и азосочетания, в соответствии с которыми определяется последовательность расчета модулей аппарата и подбираются требуемые алгоритмы.



**Рис. 3.23** Блок-схема алгоритма расчета статических и динамических режимов процессов диазотирования и азосочетания, осуществляемых в турбулентных реакторах трубчатого типа: (3.69) – (3.76), (3.81) – (3.85)

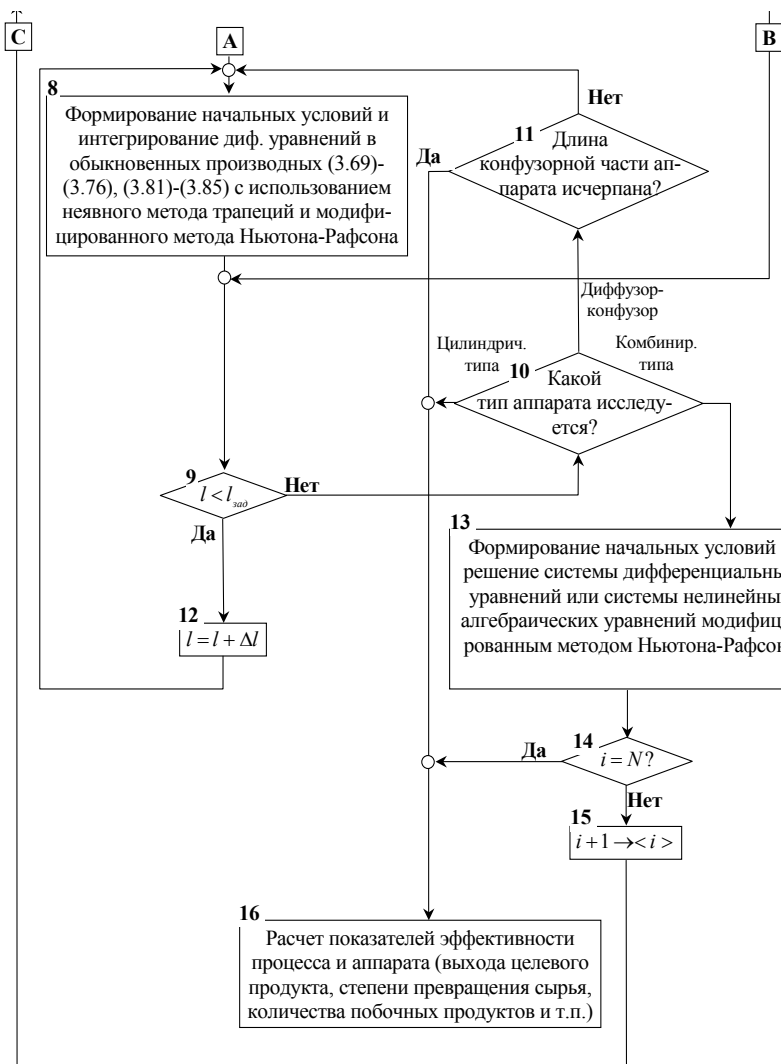


Рис. 3.6 (продолжение)

В блоке 5 вводятся исходные данные для расчета процессов и аппаратов диазотирования и азосочетания: начальный состав реакционной массы, потоки реагентов, коэффициенты математической модели, задаются настроечные параметры численных методов интегрирования дифференциальных уравнений и итерационной процедуры Ньютона-Рафсона, параметры гидродинамических режимов модулей-реакторов и т.п.

В блоке 7 определяются режимы исследования – статические или динамические. В случае исследования статических режимов в блоке 8 формируются начальные условия и производится интегрирование жестких систем дифференциальных уравнений с использованием неявной схемы трапеций. Выбор шага интегрирования в нашем алгоритме обусловлен точностью решения. При реализации неявного метода трапеций используется модифицированная итерационная процедура Ньютона-Рафсона решения нелинейных уравнений. Предсказанные должным образом значения используются для сокращения числа итераций (в наших задачах требуется не более 3 – 5 итераций на шаг) и для обеспечения заданной точности аппроксимации при соответствующем выборе шага интегрирования. Контроль точности осуществляется таким образом, чтобы наибольшая относительная погрешность аппроксимации не превосходила заданной точности  $\varepsilon$ .

В качестве тестового примера рассматривался процесс диазотирования, осуществляемый в турбулентном трубчатом реакторе цилиндрического типа в вертикальном исполнении (уравнения (3.69) – (3.76)). Решения были получены для двух значений параметра точности  $\varepsilon = 10^{-2}$  и  $\varepsilon = 10^{-3}$ . Начальный шаг  $h_0 = 10^{-4}$  м был выбран так, чтобы его порядок был сравним с порядком наименьшей временной постоянной. На рис. 3.24 показан характер увеличения шага в процессе интегрирования.

При изменении  $l$  на отрезке длины  $[0 \dots 10^{-3}]$  м быстро меняющиеся компоненты решения аппроксимируются точно благодаря использованию малых шагов. Как только эти компоненты за-

тухают в достаточной мере, длина шага быстро увеличивается до значения, которое дает достаточно большое приближение к медленно меняющимся компонентам.

В блоке 9 проверяется выполнение условия окончания расчета трубчатой части аппарата или диффузора.

В блоке 10 в зависимости от типа рассчитываемого аппарата осуществляется расчет процесса в конфузорной части аппарата (для аппарата типа диффузор-конфузор) или в качестве смешения (для комбинированного аппарата).

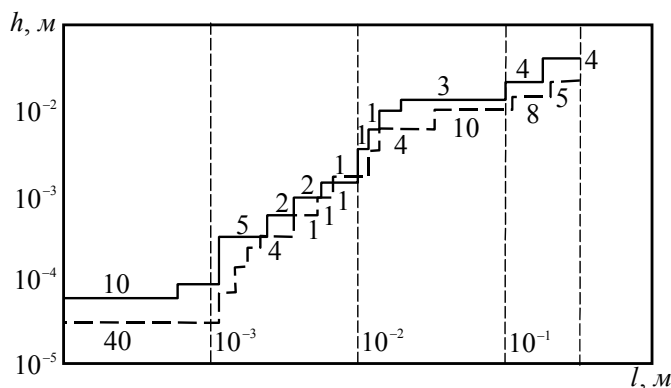


Рис. 3.31 Изменение длины шага и число шагов в решении системы (3.69) – (3.76); сплошная линия соответствует случаю  $\varepsilon = 10^{-2}$ , штриховая  $\varepsilon = 10^{-3}$

В блоке 13 формируются начальные условия и решается система нелинейных алгебраических уравнений модифицированным методом Ньютона-Рафсона или система дифференциальных уравнений с использованием неявного метода трапеций или Дормана-Принса с автоматическим выбором шага.

В блоке 14 проверяется выполнение условия расчета заданного числа  $N$  модулей-реакторов комбинированного аппарата.

В случае исследования динамических режимов в блоке 16 формируются начальные условия и интегрируются дифференциальные уравнения с частными производными (3.69) – (3.76), (3.81) – (3.85) методом конечных разностей или, после несложных преобразований и сведения задачи к решению системы дифференциальных уравнений с обыкновенными производными, методом Дормана-Принса 5-го порядка точности.

В заключительном блоке 17 производится расчет выходных показателей эффективности турбулентных трубчатых аппаратов: выход целевого продукта (диазосоединения или пигмента), степень превращения сырья (амин), просок твердой фазы амина при диазотировании, содержимое побочных продуктов в красителе, гранулометрический состав пигмента и т.п.

#### 4 ОПТИМИЗАЦИЯ И ИССЛЕДОВАНИЕ ГИБКОСТИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ (СИСТЕМ) В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ИСХОДНОЙ ИНФОРМАЦИИ

Проектирование технологического объекта (технологического процесса, аппаратов и систем автоматического управления режимами ТП) включает в себя разработку технического задания (ТЗ), отражающего потребности общества в продукции этого производства, и реализацию ТЗ в виде проектной документации [37, 38]. Обычно ТЗ представляют в виде некоторых документов и оно является исходным (первичным) описанием проектируемого производства. Результатом проектирования служит полный комплект документации, соединяющий достаточные сведения для воспроизводства (изготовления объекта проектирования). Эта документация и есть проект, точнее окончательное описание проектируемого производства [37, 38].

При проектировании технологического производства решается комплекс сложнейших задач (рис 4.1): выбор способа (технологии) производства и структуры, расчет и выбор технологического оборудования, определение оптимальных режимов его функционирования, разработка систем автоматического управления (регулирования) и (или) автоматизированного управления отдельными технологическими стадиями (процессами) и производством в целом, составление оперативно-производственных планов и др. [38, 39].

Основные идеи и принципы проектирования сложных систем, к которым безусловно относятся и химические производства, выражены в системном подходе. Основной принцип системного подхода заключается в рассмотрении частей сложной системы с учетом их взаимодействия.

Применительно к проектированию химического производства системный подход включает в себя определение оптимальной структуры производства, типизацию связей (выбор технологического оборудования по стадиям производства и системы трубопроводных коммуникаций между ними), определение атрибутов (расчет конструктивных параметров и режимных переменных производства), анализ влияния внешней среды. Для системного подхода к проектированию сложных систем характерны следующие особенности:

- 1) структуризация процесса проектирования, выражаемая декомпозицией проектных задач и документации, выделением стадий, этапов, проектных процедур;
- 2) итерационный характер проектирования;
- 3) типизация и унификация проектных решений и средств проектирования.

Ответственные организации

Заказчик, проектировщик, НИИ

Проектировщик (технологи)

строители; специалисты:  
 – по автоматизации;  
 – по электроснабжению и освещению;  
 – по отоплению и вентиляции;  
 – по водоснабжению;  
 – по конструированию нестандартного оборудования.

Проектировщик (механики)

Проектировщик (экономисты)

Строительно-монтажная организация

Пуско-наладочная организация, проектировщик

Пуско-наладочная организация, проектировщик, НИИ, заказчик

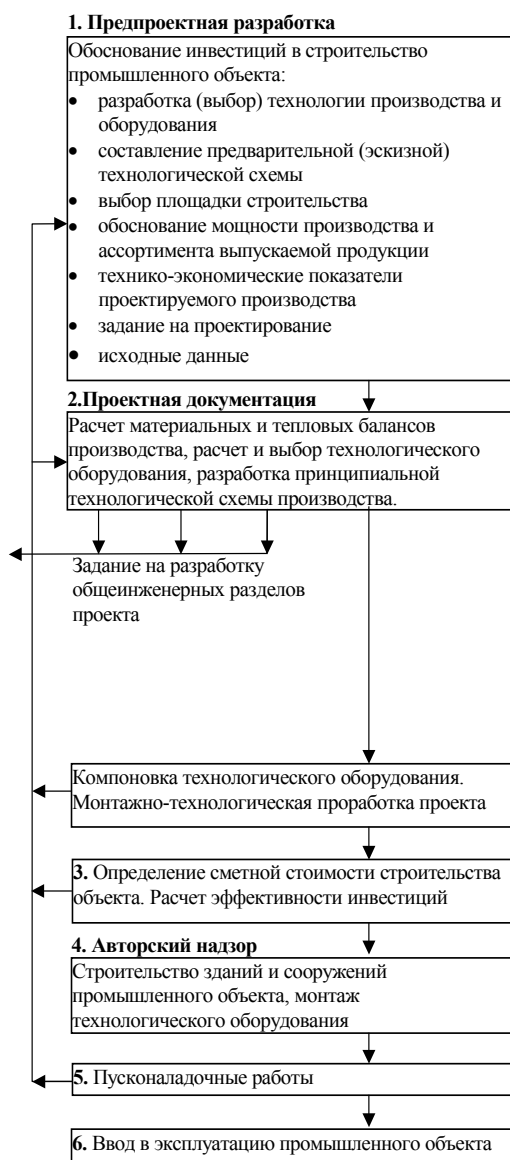


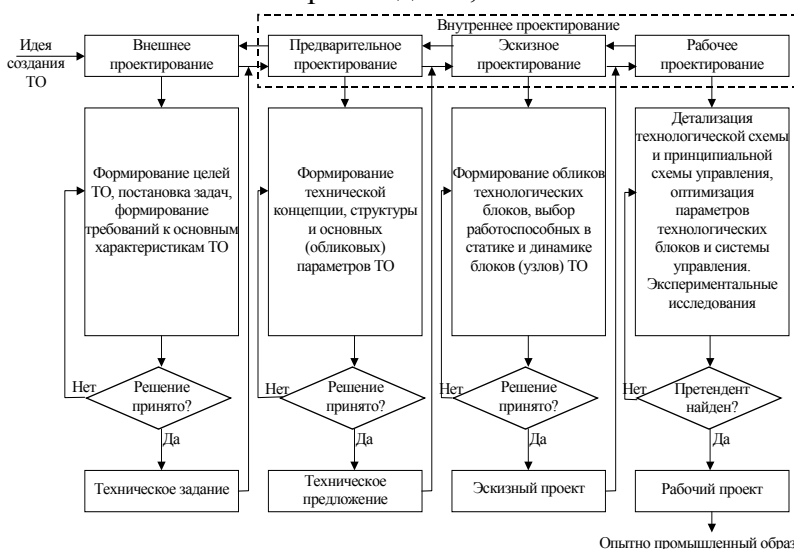
Рис. 4.1 Блок-схема принятия решений в процессе проектирования

## химического производства

Этапы и стадии проектирования – наиболее крупные части процесса проектирования, развивающегося во времени (рис. 4.2). Выделяют этапы внешнего и внутреннего проектирования. На этапе внешнего проектирования задаются цели проектируемого производства, достижение которых оценивают по различным показателям, в частности, по функциональному назначению, экономическим затратам, гибкости производства, надежности и экологической безопасности функционирования. На этапе внутреннего проектирования осуществляется собственно синтез гибкого производства, обеспечивающего достижение целей, заданных на этапе внешнего проектирования. В общем случае, на этапе внутреннего проектирования выделяют стадии научно-исследовательских работ (на рис. 4.1 не показана), эскизного проекта или опытно-конструкторских работ, технического, рабочего проектирования, испытаний опытных образцов. Очевидно, что по мере перехода от стадии к стадии степень подробности и тщательности проработки проекта возрастает, и рабочий проект уже должен быть вполне достаточным для изготовления опытных или серийных образцов.

В ТЗ на проектирование химического производства указывают следующие сведения [37, 38]:

- назначение производства;
- литературные данные о технологии производства и сведения об аналогичных производствах за рубежом;
- обзор научно-исследовательских работ по отдельным технологическим стадиям производства; описание технологических схем опытных и полупромышленных установок, на которых отработывался технологический процесс;
- основные технико-экономические показатели объекта, в том числе мощность, производительность, производственная программа (план);
- требования к качеству, конкурентной способности и экологическим параметрам продукции;
- требования к технологии;
- техническая характеристика исходного сырья, основных продуктов и вспомогательных материалов (включая воду, азот для технических целей, теплоносители и хладагенты); области применения основных продуктов;
- физико-химические свойства исходных, получаемых промежуточных и конечных продуктов;
- химизм процесса по стадиям; физико-химические основы процесса, предварительная (эскизная) технологическая схема производства;



Опытно-промышленный образец **Рис. 4.2** Этапы проектирования технологического объекта

- рабочие (номинальные) технологические параметры (режимы) производства;
- материальный баланс производства по стадиям процесса;
- характеристика побочных продуктов и отходов; рекомендации по их утилизации;
- математическое описание технологических стадий;
- рекомендации по автоматизации производства;



- методы очистки сточных вод и обезвреживания газовых выбросов;
- экономическое обоснование производства, включающее прогнозы потребности в товарном продукте и обеспечение производства сырьем на перспективу.

Из приведенного перечня требований (рекомендаций) ТЗ следует особо выделить вопросы, касающиеся условий эксплуатации химического производства и требований к выходным переменным производства (технологических процессов и аппаратов), интересующим потребителя. Наряду с качественными характеристиками (представленными в вербальной форме) можно выделить числовые параметры, для которых указаны области допустимых значений. Требования к выходным переменным выражаются, как правило, в виде условий работоспособности производства

$$y_i R y_i^H, \quad (4.1)$$

где  $y_i$  –  $i$ -ая выходная переменная ХТП;  $R$  – вид отношения ( $=, <, >, \leq, \geq$ );  $y_i^H$  – норма  $i$ -ой выходной переменной.

Фактически условия работоспособности производства (4.1) представляют собой ограничения по спецификации качества производимого продукта, производительности, экологической безопасности производства и др. Проблема выполнения условий работоспособности (4.1) сильно осложняется наличием неопределенности в физической, химической и экономической информации, используемой при проектировании процесса.

При проектировании химических производств часто случается, что некоторые параметры являются неопределенными, например, коэффициенты переноса, константы скоростей химических реакций или стоимость выпускаемого продукта не могут быть точно установлены. Кроме того, во время эксплуатации производства могут случайным образом изменяться внешние параметры (температуры, скорости и составы потоков сырья и др.).

В связи с этим принципиально важно рассматривать на стадии проектирования влияние неопределенных параметров на работоспособность и оптимальность функционирования производства.

#### 4.1 Гибкость (работоспособность) технологических объектов

Традиционно при проектировании решается следующая задача оптимизации

$$\min_{d,z} \bar{I}(d, x, z, \theta^N), \quad (4.2)$$

при связях и ограничениях

$$\begin{aligned} h(d, x, z, \theta^N) &= 0 \\ \bar{g}_j(d, x, z, \theta^N) &\leq 0, \quad j \in J, \end{aligned}$$

где  $J$  – множество индексов ограничений работоспособности ( $1, 2, \dots, m$ );  $d$  – вектор проектных (конструктивных) переменных;  $z$  – вектор управляющих переменных;  $x$  – вектор переменных состояния;  $\theta^N$  – номинальное значение вектора неопределенных параметров.

Если вектор переменных состояния  $x$  выразить (может быть неявно) как функцию  $d, z, \theta^N$  из уравнений материального и теплового баланса  $h(d, x, z, \theta^N) = 0$  и подставить в функции  $\bar{I}(d, x, z, \theta^N)$  и  $\bar{g}_j(d, x, z, \theta^N)$ , то получим известную "приведенную" постановку задачи оптимизации (4.2)

$$\min_{d,z} I(d, z, \theta^N), \quad (4.3)$$

при ограничениях

$$g_j(d, z, \theta^N) \leq 0, \quad j \in J.$$

Учет неопределенности вектора  $\theta$  при традиционном проектировании осуществляется введением эмпирического коэффициента запаса  $\gamma_{\text{зап}}$  (обычно  $\gamma_{\text{зап}} = 1,25$ ) к размерам оборудования, полученным в результате решения задачи нелинейного программирования (4.3). Понятно, что традиционная процедура не имеет рациональной основы для выбора коэффициента запаса  $\gamma_{\text{зап}}$ , что зачастую приводит к неработоспособности спроектированного химического производства и необходимости его перепроектирования, а это сопряжено с дополнительными затратами.

Таким образом, задача проектирования химического производства должна ставиться с учетом наличия неопределенности в исходной информации и математической модели производства.

Переменные в задаче оптимального проектирования химического производства в условиях неопределенности параметров могут быть разделены на четыре категории. Вектор  $d$  проектных параметров ассоциируется со структурой производства и размерами оборудования. Эти переменные, как правило, считаются неизменными, когда проект реализован, и не меняются в процессе функционирования производства.

Вектор  $z$  обозначает управляющие переменные, которыми можно манипулировать в процессе функционирования производства таким образом, чтобы, во-первых, выполнялись требования ТЗ и обеспечивалась работоспособность производства, во вторых, минимизировались эксплуатационные затраты.

Вектор  $x$  соответствует переменным состояниям производства, определяемым через решение системы уравнений материального и теплового баланса технологических стадий производства. Более строго переменными состояниями  $x_i, i = 1, 2, \dots, n$  динамической системы называют такие независимые переменные, набор которых достаточен для полного математического описания состояния производства (процесса) в динамике [40]. Это означает, что по заданным значениям  $x_{10}, x_{20}, \dots, x_{n0}$  всех переменных состояния в некоторый фиксированный момент времени  $t = t_0$ , по заданным значениям воздействий во все последующие моменты  $t > t_0$  и по уравнениям математической модели можно определить значения всех переменных состояния в любой последующий момент времени  $t > t_0$ .

Число переменных состояния обычно больше числа управляемых величин. Напрашивается такой выбор переменных состояния, чтобы часть их совпадала с управляемыми величинами и управляемые величины  $y_1, y_2, \dots, y_k$  могли быть выражены как функции переменных состояния. Тогда к уравнениям системы переменных состояния

$$\frac{dx_i}{dt} = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n, z_1, z_2, \dots, z_m, \theta, t), \quad i = 1, 2, \dots, n,$$

добавляются уравнения

$$y_j = \varphi_j(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad j = 1, 2, \dots, k.$$

Вектор  $\theta$  задает неопределенные параметры. Предположим, что нам задано номинальное значение вектора неопределенных параметров  $\theta^N$  и ожидаемые отклонения  $\Delta\theta^+, \Delta\theta^-$  от номинального значения  $\theta^L = \theta^N - \Delta\theta^-, \theta^U = \theta^N + \Delta\theta^+$ . Тогда область  $T$ , содержащую все возможные значения неопределенных параметров, можно представить в следующем виде

$$T = \{\theta \mid \theta^L \leq \theta \leq \theta^U\}. \quad (4.4)$$

Важнейшим компонентом работоспособности проектируемого производства является "гибкость" – способность производства иметь допустимую рабочую точку (режим) функционирования для всего диапазона  $T$  неопределенных условий, которые могут возникать в процессе эксплуатации этого производства. Понятно, что и другие компоненты работоспособности производства, такие как управляемость, надежность, безопасность и др. в равной степени важны. Тем не менее, исследование гибкости проектируемого производства – это первый шаг, который должен быть сделан для оценки работоспособности проекта.

Можно сформулировать две задачи, связанные с анализом гибкости проектируемого производства: А – оценка работоспособности производства для априори заданного интервала неопределенности; Б – количественная оценка гибкости проекта и определение максимально достижимого уровня индекса гибкости проекта [41, 42].

Задача анализа работоспособности проектируемого производства, определяемого вектором проектных параметров  $d$ , будет заключаться в определении управляющих переменных  $z$  таких, чтобы выполнить ограничения (требования по спецификации качества выпускаемой продукции, производительности, надежности технологического оборудования, безопасности производства и др.):

$$g_j(d, z, \theta) \leq 0, \quad j \in J, \quad (4.5)$$

для всех  $\theta \in T$ . Математически эта задача может быть сформулирована следующим образом [41, 42]:

$$\Psi(d, \theta) = \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta), \quad (4.6)$$

где  $\Psi(d, \theta)$  – функция выполнимости ограничений (4.5). Если  $\Psi(d, \theta) \leq 0$ , то проектируемое производство, описываемое вектором  $d$ , работоспособно; в противном случае, при  $\Psi(d, \theta) > 0$  – неработоспособно. При  $\Psi(d, \theta) = 0$  проектируемое производство с вектором  $d$  находится на границе допустимой области функционирования, поскольку в этом случае  $g_j(d, z, \theta) = 0$  хотя бы для одного номера  $j \in J$ . Задачу (4.6) можно переформулировать в форме стандартной задачи математического программирования, определяя скалярную величину  $\alpha$  такую, что

$$\Psi(d, \theta) = \min_{z, \alpha} \alpha, \quad (4.7)$$

при ограничениях

$$g_j(d, z, \theta) \leq \alpha, \quad j \in J.$$

Если  $g_j(\bullet)$  – нелинейные функции по  $z$ , то задача (4.7) представляет собой задачу нелинейного программирования.

Для установления работоспособности проектируемого производства необходимо убедиться в том, что  $\Psi(d, \theta) \leq 0$  для всех  $\theta \in T$ . В этом случае задача анализа гибкости проектируемого производства, описываемого вектором проектных параметров  $d$ , может быть сформулирована в следующем виде [41, 42]:

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \Psi(d, \theta), \quad (4.8)$$

где  $\chi(d)$  – соответствует функции гибкости проекта производства с вектором  $\alpha$ .

При  $\chi(d) \leq 0$  допустимое функционирование (работоспособность) производства может быть достигнуто для всей области  $T$  возможных изменений вектора неопределенных параметров  $\theta$ .

При  $\chi(d) > 0$  допустимое функционирование производства невозможно для некоторой подобласти  $T$ .

Математическая постановка задачи (А) анализа гибкости проектируемого производства может быть сформулирована в следующем виде

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta), \quad (A)$$

В работе [41] впервые введена количественная оценка гибкости проекта, определяемого вектором конструктивных параметров  $d$ . Запишем область изменения неопределенных параметров в виде:

$$T(\delta) = \{\theta \mid \theta^N - \delta \Delta \theta^- \leq \theta \leq \theta^N + \delta \Delta \theta^+\}$$

где  $\delta$  – неотрицательная скалярная переменная: при  $\delta = 1$  имеем  $T(1) = T$ ; при  $\delta < 1$  –  $T(\delta) \subset T$ ; при  $\delta > 1$  –  $T \subset T(\delta)$ .

**Определение.** Будем называть индексом гибкости  $F$  наибольшее значение  $\delta$ , для которого выполняются ограничения (4.5) для всей области  $T(F)$ .

Сформулируем математическую постановку задачи (Б) определения индекса гибкости  $F$  проектируемого производства, описываемого вектором проектных параметров  $d$ .

$$F = \max \delta$$

при ограничениях

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta) \leq 0;$$

$$T(\delta) = \{\theta \mid \theta^N - \delta \Delta \theta^- \leq \theta \leq \theta^N + \delta \Delta \theta^+\};$$

$$T(F) = \{\theta \mid \theta^N - F \Delta \theta^- \leq \theta \leq \theta^N + F \Delta \theta^+\}.$$

Значения неопределенных параметров  $\theta^c \in T(F)$ , соответствующие решению задачи (Б), называются критическими точками.

Если удастся установить, что критические точки соответствуют вершинам многогранника  $T(F)$ , то решение задач (А) и (Б) может быть значительно упрощено. Рассмотрим задачу анализа гибкости проекта в предположении, что  $\theta^k, k \in K$  представляют вершины многогранника  $T$ . В этом случае можно записать, что

$$\chi(d) = \max_{k \in K} \Psi(d, \theta^k) \quad (\text{А}') )$$

где  $\Psi(d, \theta^k)$  находится из решения задачи оптимизации (4.7).

Следует заметить, что в задаче (Б) величина  $\chi(d)$  достигает нулевого значения,  $\chi(d) = 0$ , в точке оптимального решения, поскольку критическая точка всегда будет находиться на границе допустимой области функционирования производства. Пусть  $\Delta\theta^k, k \in K$  обозначает направление от номинальной точки  $\theta^N$  до  $k$ -ой вершины многогранника  $T$ . Тогда максимальное отклонение  $\delta^k$  от границы вдоль  $\Delta\theta^k$  мы получим из решения следующей экстремальной задачи:

$$\delta^k = \max_{z, \delta} \delta, \quad k \in K \quad (\text{Б}')$$

при ограничениях

$$g_j(d, z, \theta^k) \leq 0, \quad j \in J, \\ \theta^k = \theta^N + \delta \Delta\theta^k.$$

Анализ полученных прямоугольных областей изменения  $\theta$  показывает, что только наименьший прямоугольник может быть вписан в допустимую область, что определяет индекс гибкости

$$F = \min_{k \in K} \{\delta^k\}.$$

На рис. 4.3 изображен диапазон изменения вектора неопределенных параметров  $\theta$ , который ассоциируется с индексом гибкости для данного проекта [43].

В работе [41] доказано, что только при условии выпуклости функций  $g_j(\bullet)$  по переменным  $z$  и  $\theta$  критические точки  $\theta^c$  будут соответствовать вершинам многогранника  $T$ .

Это условие существенно ограничивает применение рассмотренных выше постановок задач анализа гибкости (А) и определение индекса гибкости (Б) при проектировании химических производств, поскольку возникают существенные трудности в проверке условий выпуклости функций ограничений  $g_j(\bullet)$ .

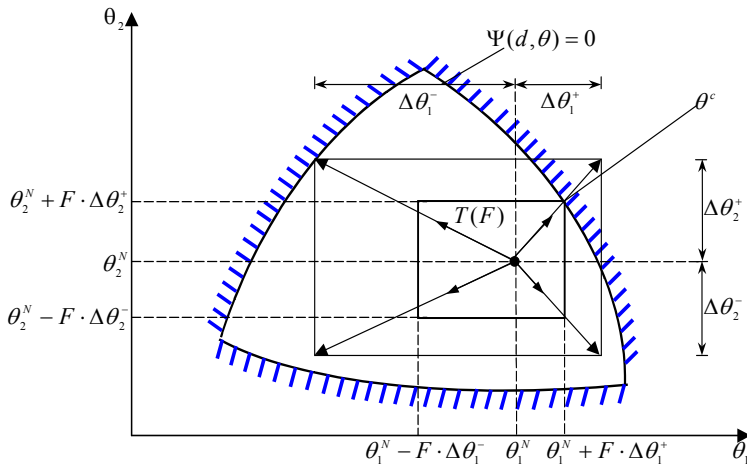
Вторая проблема, возникающая при решении сформулированных выше задач (А) и (Б) методом анализа вершин многогранника  $T$ , – проблема размерности решаемой задачи. Так при  $n_p = 10$  требуется решение экстремальных задач типа (4.7) в количестве  $2^{10} = 1024$ , а при  $n_p = 20$  –  $2^{20} = 1\,048\,576$ , где  $n_p$  – размерность вектора  $\theta \in T$ .

В работе [44] разработана стратегия активных наборов ограничений, в соответствии с которой идентифицируются потенциально активные ограничения, лимитирующие гибкость производства. Для иллюстрации применения стратегии активных наборов ограничений приведем свойство функции  $\Psi(d, \theta)$  определяемой задачей (4.7) (доказательство этого свойства приведено в [45]).

**Свойство.** Если квадратная матрица размером  $n_z \times n_z$  частных производных

$$\left\{ \frac{\partial g_1}{\partial z}, \frac{\partial g_2}{\partial z}, \dots, \frac{\partial g_m}{\partial z} \right\}, \quad m \geq n_z + 1$$

имеет полный ранг, то число активных ограничений  $g_j(d, z, \theta) = \alpha, j \in J_A$ , равно  $n_z + 1$  где  $n_z$  – число управляющих переменных  $z$ ,  $J_A$  – множество активных ограничений.



**Рис 4.3 Наибольшая допустимая область изменения параметров  $\theta$**

Отметим два важных применения свойства для случая  $n_z + 1$  активных ограничений. Первое следует из того факта, что набор активных ограничений  $g_j(d, z, \theta) = \alpha$ ,  $j \in J_A$  включает  $n_z + 1$  уравнений с  $(n_z + 1)$  неизвестными  $(d, z)$ . В связи с этим функция работоспособности проектируемого производства определена непосредственно этими уравнениями и обозначается  $\Psi(d, \theta) = \alpha_A$ . Второе применение заключается в том, что двухуровневая задача оптимизации (4.8) может быть переписана в виде

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \alpha_A, \quad (4.9)$$

где  $\alpha_A$  определяется из системы уравнений, соответствующих набору активных ограничений для заданного вектора  $\theta$ .

Следует заметить, что сформулированная задача (4.9) приводит к некоторому упрощению двухуровневой задачи оптимизации (4.8). Однако, набор активных ограничений может изменяться в зависимости от вектора  $\theta$ , что приводит к значительному усложнению алгоритма решения задачи (4.9).

В работах [46, 47] приводятся необходимые условия Каруша-Куна-Таккера, которые применительно к задаче (4.8) имеют вид:

$$\begin{aligned} \sum_{j \in J} \lambda_j &= 1; \\ \sum_{j \in J} \lambda_j \frac{\partial g_j}{\partial z} &= 0; \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} \lambda_j (g_j(d, z, \theta) - \alpha) &= 0, \quad j \in J; \\ \lambda_j \geq 0, \quad g_j(d, z, \theta) - \alpha &\leq 0, \quad j \in J. \end{aligned}$$

где  $\lambda_j, j \in J$  – множители Лагранжа; равенства  $\lambda_j (g_j(\bullet) - \alpha) = 0, j \in J$  обычно называют условиями дополняющей нежесткости; они требуют, чтобы  $\lambda_j = 0$ , если соответствующее ограничение в точке не активно, т.е.  $g_j(d, z, \theta) < 0$ , и  $\lambda_j > 0$  только для активных ограничений в точке  $z$  [46, 47].

Для случая, когда  $n_z + 1$  ограничений активно, в работе [44] показано, что уравнения (4.10) являются необходимыми и достаточными условиями локального минимума (4.7) применительно к выпуклым и невыпуклым ограничениям. В случае квазивыпуклых ограничений по  $z$  уравнения (1.19) определяют глобальный минимум задачи (4.7).

С целью выявления набора активных ограничений в работе [44] введены переменные  $s_j \geq 0$ , обозначающие некоторый запас (сдвиг) для неактивных ограничений  $g_j(d, z, \theta) - \alpha \leq 0$  такие, что

$$g_j(d, z, \theta) + s_j = \alpha, \quad j \in J,$$

булевы переменные

если ограничение активно,  
но,

$$y_j = \begin{cases} 1, & \text{если ограничение актив-} \\ 0, & \text{но,} \end{cases}$$

в противном случае;

и установлены связи между переменными  $y_j, s_j$  и  $\lambda_j$  через логические множества

$$\left. \begin{array}{l} s_j \leq U(1 - y_j) \\ \lambda_j \leq y_j \end{array} \right\} j \in J, \quad (4.11)$$

где  $U$  – верхняя граница для запаса (сдвига) ограничений; при  $y_j = 1 - s_j = 0, 0 \leq \lambda_j \leq 1$ ; при  $y_j = 0 - 0 \leq s_j \leq U, \lambda_j = 0$ .

Приведенные выше неравенства эквивалентны условиям дополняющей нежесткости

$$\lambda_j(g_j(d, z, \theta) - \alpha) = 0,$$

и кроме того, учитывая свойство для функции  $\Psi(d, \theta)$ , получим равенство

$$\sum_{j \in J} y_j = n_z + 1. \quad (4.12)$$

Из вышеприведенных неравенств следует:

- а) если  $y_j = 1$ , тогда  $\lambda_j \geq 0, s_j = 0$  и  $j$ -ое ограничение активно;
- б) если  $y_j = 0$ , тогда  $\lambda_j = 0, s_j \geq 0$  и  $j$ -ое ограничение неактивно;

Поскольку  $\Psi(d, \theta) = \alpha_A$  может быть определено из условий Куна-Таккера (4.10) с ограничениями, выраженными в дискретной форме (4.11), (4.12), задача (А) может быть переписана в следующем виде

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T, z, \alpha, s_j, \lambda_j, y_j} \alpha,$$

при ограничениях

$$\begin{aligned} g_j(d, z, \theta) + s_j = \alpha, \quad j \in J, \quad \sum_{j \in J} \lambda_j = 1, \quad \sum_{j \in J} \lambda_j \frac{\partial g_j}{\partial z} = 0, \\ \left. \begin{array}{l} \lambda_j - y_j \leq 0 \\ s_j - U(1 - y_j) \leq 0 \end{array} \right\} j \in J, \quad \sum_{j \in J} \lambda_j = n_z + 1, \quad \theta^L \leq \theta \leq \theta^U, \\ y_j = [0, 1], \quad \lambda_j, s_j \geq 0, \quad j \in J. \end{aligned} \quad (P1)$$

Таким образом, для любой комбинации бинарных переменных (т.е. для заданного множества  $n_z + 1$  активных ограничений) все другие переменные  $\alpha, z, \lambda_j, s_j$  могут быть определены как функции  $\theta$ . Однако, допустимый выбор  $n_z + 1$  бинарных переменных единственный, когда  $\lambda_j, s_j$  удовлетворяют условиям неотрицательности в (P1). Необходимо также заметить, что хотя  $z$  возникает в задаче (P1) как переменная максимизации целевой функции  $\alpha$ , она на самом деле выбирается из условия минимизации  $\alpha$ . Это следует из того факта, что уравнения (4.10), которые включены как ограничения в (P1), определяют условия минимума  $\alpha$  по переменной  $z$ .

Математическая формулировка задачи анализа работоспособности проектируемого производства (задачи (А), (P1)) представляет задачу смешанного целочисленного программирования, поскольку содержит одновременно непрерывные и целочисленные переменные. Здесь важно отметить, что в задаче (P1) не предполагается наличие критических точек в вершинах многогранника  $\min \max \min$  задачи (А) и не требуется решения задачи (А') для  $2^{n_p}$  вершин многогранника  $T$ , где  $n_p$  – размерность вектора  $\theta \in T$ . Комбинаторная задача (P1) зависит от числа возможных наборов активных ограничений в (4.7). На самом деле максимальное число сочетаний  $n_z + 1$  активных ограничений составляет

$$\frac{m!}{(n_z + 1)!(m - n_z - 1)!},$$

где  $m(m \geq n_z + 1)$  – число ограничений неравенств.

Однако, неотрицательность переменных  $\lambda_j, s_j$  в задаче (P1) несколько ограничивает число возможных сочетаний активных ограничений, что установлено при решении многих задач в [44].

Аналогичным образом может быть сформулирована задача смешанного целочисленного программирования для определения индекса гибкости проекта химического производства:

$$F = \min_{\theta \in T, z, s_j, \lambda_j, y_j} \delta,$$

при ограничениях

$$\begin{aligned} g_j(d, z, \theta) + s_j - \alpha &= 0, \quad j \in J, \\ \alpha &= 0, \quad \sum_{j \in J} \lambda_j = 1, \quad \sum_{j \in J} \lambda_j \frac{\partial f_j}{\partial z} = 0, \\ \left. \begin{aligned} \lambda_j - y_j &\leq 0 \\ s_j - U(1 - y_j) &\leq 0 \end{aligned} \right\} j \in J, \quad \sum_{j \in J} y_j = n_z + 1, \\ \theta^N - \delta \Delta \theta^- &\leq \theta \leq \theta^N + \delta \Delta \theta^+, \\ \delta &\geq 0; y_j = [0, 1]; \lambda_j, s_j \geq 0, \quad j \in J. \end{aligned} \quad (P2)$$

где ограничение  $\alpha = 0$ , вообще говоря излишне, но оно было включено в первое уравнение ограничений для сравнения с задачей (P1).

Обсудим случай, когда функции ограничений  $g_j(d, z, \theta)$  являются нелинейными функциями. Основная трудность, которая возникает в этом случае, заключается в необходимости вычисления частных производных, которые в отличие от линейных ограничений, не постоянны. Это может приводить к очень трудной задаче, несмотря на то, что существуют методы, гарантирующие строгое решение задач (P1), (P2) для ограниченных функций  $g_j(\bullet)$  ограничений.

Разработанная в [44] стратегия активных наборов ограничений декомпозирует решение задачи смешанного целочисленного нелинейного программирования на совокупность задач нелинейного программирования, при решении которых избегают исчерпывающего использования стационарных условий. Показано, что предложенная стратегия является строгой для специальных типов функций ограничений, которые должны быть монотонными по управляющим переменным  $z$ , и позволяет находить значения "не вершинных" критических точек. Предполагая, что функции ограничений  $g_j(d, z, \theta)$ ,  $j \in J$  монотонны по  $z$  (в том смысле, что каждый компонент градиентов  $\nabla_z g_j(d, z, \theta)$  остается одного знака для всех значений  $\theta$ ) потенциально активные наборы ограничений могут быть определены из условий

$$\sum_{j \in J} \lambda_j \frac{\partial g_j}{\partial z} = 0, \quad \lambda_j - y_j \leq 0, \quad j \in J, \quad \sum_{j \in J} y_j = n_z + 1.$$

Поскольку условие  $\lambda_j \geq 0$  должно выполняться для каждого ограничения  $j \in J$ , тогда, если компоненты  $\frac{\partial g_j}{\partial z}$  будут одного знака, первое уравнение будет определять различие комбинаций  $n_z + 1$  активных ограничений, которые могут удовлетворять этому уравнению.

В задаче оптимального проектирования химического производства проектные переменные  $d$  должны быть выбраны таким образом, чтобы минимизировать математическое ожидание стоимости  $C(d, z, \theta)$  проекта химического производства, используя двухэтапную постановку (стратегию)

$$\min_d M_\theta \left[ \min_z C(d, z, \theta) \mid g(d, z, \theta) \leq 0 \right], \quad (4.13)$$

где  $M_\theta \{\bullet\}$  – символ математического ожидания случайной величины  $\theta$ . Причина, по которой задача (4.13) названа двухэтапной, заключается в том, что ее решение состоит из двух этапов:

1) внутренняя задача

$$\min_z C(d, z, \theta)$$

при ограничениях

$$g(d, z, \theta) \leq 0.$$

Ее решение осуществляется как бы на стадии функционирования производства при фиксированных значениях  $d$  (проект реализован и функционирует) и  $\theta$  (предполагается, что вектор  $\theta$  может быть идентифицирован при эксплуатации производства). Будем обозначать решение внутренней задачи через  $\hat{C}(d, \hat{z}_{d,\theta}, \theta)$ .

2) внешняя задача

$$\min_d M_\theta \{ \hat{C}(d, \hat{z}_{d,\theta}, \theta) \}$$

решается на стадии проектирования и поскольку нам неизвестен вектор  $\theta$ , то решение внутренней задачи и вычисление  $\hat{C}(d, \hat{z}_{d,\theta}, \theta)$  осуществляется многократно (в данном случае бесконечное число раз), чтобы вычислить математическое ожидание  $M_\theta \{ \hat{C}(d, z_{d,\theta}, \theta) \}$ .

В вышеописанной двухэтапной стратегии неявно принимается допущение о том, что управление  $\hat{z}$  может быть немедленно установлено в зависимости от изменения  $\theta$ . При этом не учитываются задержки в измерениях переменных состояния производства, вычислениях и реализации управляющих переменных  $\hat{z}_\theta$ . Кроме того, при реализации этой стратегии может возникнуть ситуация, когда для некоторых значений  $\tilde{d}, \tilde{\theta}$  не удастся подобрать управляющие переменные  $z$ , при которых выполняются ограничения  $g(d, z, \theta) \leq 0$ . Это означает, что область изменения неопределенных параметров  $T(\delta)$  необходимо уменьшать за счет изменения величины  $\delta$ :

$$T(\delta) = \{ \theta \mid \theta^L - \delta \Delta \theta^- \leq \theta \leq \theta^U + \delta \Delta \theta^+ \}. \quad (4.14)$$

В этом случае задачу (4.13) можно переформулировать как

$$\min_d M_{\theta \in T(F)} \left[ \min_z C(d, z, \theta) \mid g(d, z, \theta) \leq 0 \right],$$

при ограничениях

$$\max_{\theta \in T(F)} \Psi(d, \theta) \leq 0,$$

где  $F$  – индекс гибкости производства.

Бесконечное число точек  $T(F)$  может быть аппроксимировано дискретным множеством точек  $\theta^k$ ,  $k = 1, 2, \dots, K$ , которое выбирается из условия наилучшего покрытия множества  $T(F)$  сеткой. В результате можно получить конечномерную по  $\theta$  задачу оптимального проектирования:

$$\min_{d, z^1, z^2, \dots, z^k} \sum_{k=1}^K w_k C(d, z^k, \theta^k), \quad (4.14')$$

при ограничениях

$$g(d, z^k, \theta^k) \leq 0, \quad k = \overline{1, k},$$

где  $w^k$  – веса, которые присвоены каждой точке  $\theta^k$ ;  $\sum_{k=1}^K w_k = 1$ . Весовые коэффициенты могут быть выбраны (интерпретированы) как вероятности того, что вектор неопределенных параметров  $\theta$  примет значение  $\theta^k$ .

Алгоритм аппроксимации задачи (4.14) с помощью задачи (4.14') включает следующие шаги.

**Шаг 1.** Выбирается априори начальное множество точек  $\theta^k$ ,  $k = \overline{1, k}$ .

**Шаг 2.** Решается многомерная задача оптимизации (4.14') с целью определения вектора проектных переменных параметров  $d$ .



**Шаг 3.** Проверяется работоспособность проекта химического производства в области  $T(F)$ , определяемого вектором  $d$ , через решение задачи

$$F = \max \delta,$$

при ограничении

$$\chi(d) = \max_{\theta \in F} \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta).$$

Если проект химического производства осуществим, то процедура прерывается, иначе находится критическая точка  $\theta^c$  из оценки гибкости, которая добавляется в дискретный ряд  $\theta$  – точек и осуществляется переход к шагу 2.

В работе [42] показано, что при решении практических задач проектирования требуется максимум одна-две итерации для нахождения работоспособного проекта производства этим методом и определения области  $T(F)$ .

#### **4.2 Стратегия оптимизационного исследования и методы решения задач статической и динамической оптимизации технологических объектов**

Задачи статической оптимизации технологических объектов традиционно формулируются в форме задачи нелинейного программирования (НЛП) с ограничениями типа равенств и неравенств. В работах [48 – 52] установлено, что в случае многих переменных квадратичная аппроксимация (например используемая в методе Ньютона) обычно дает хорошие оценки точек безусловного минимума. Более того, группа квазиньютоновских методов позволяет пользоваться преимуществами квадратичной аппроксимации, не строя в явном виде полную аппроксимирующую функцию второго порядка на каждой итерации. Квазиньютоновские методы способны ускорить вычислительный процесс

при использовании их в рамках процедур определений направлений поиска для методов приведенного градиента и проекций градиента.

В методе последовательного квадратичного программирования решение общей задачи НЛП ищется путем замены каждой нелинейной функции локальной квадратичной аппроксимацией в точке приближенного решения  $x^0$  и решения получаемой последовательности аппроксимирующих подзадач. При этом установлено [48], что для задач квадратичного программирования существуют специальные методы, дающие решение за конечное число итераций без одномерного поиска при использовании вместо него итерации симплексного типа.

В 1980 г. К. Шитковский опубликовал в работе [52] результаты обширного исследования программ НЛП. В экспериментах использовались более 20 программ и 180 тестовых задач, генерируемых случайным образом; при этом структура задач была заранее определена, и для каждой из них многократно задавались начальные приближения. Тесты были проведены для четырех программ методов штрафных функций, 11 программ методов множителей Лагранжа, трех программ метода обобщенного приведенного градиента (ОПГ) и четырех программ метода последовательного квадратичного программирования (ПКП).

Программы оценивались по следующим критериям: 1) робастность; 2) надежность; 3) глобальная сходимость; 4) способность решать вырожденные и плохо обусловленные задачи; 5) чувствительность к малому изменению условий задачи; 6) простота обращения с программой.

На основе многочисленных тестов К. Шитковский пришел к весьма интересным выводам относительно классов алгоритмов и дал рекомендации по разработке программного обеспечения. В соответствии с его исследованиями классы алгоритмов можно проранжировать следующим образом: 1) методы

ПКП; 2) методы ОПГ; 3) методы множителей; 4) методы штрафных функций, не вошедшие в первые три класса.

Теперь рассмотрим некоторые принципы проведения оптимизационного исследования. Известно, что задача, к которой можно применить оптимизационные методы, должны включать критерий эффективности, независимые переменные, ограничения в виде равенств и неравенств, которые и образуют модель рассматриваемой системы.

Описанные и построенные модели реального объекта – важнейший этап оптимизационного исследования, так как он определяет практическую ценность получаемого решения и возможность его реализации.

Процесс оптимизации с использованием модели можно рассматривать как метод отыскания оптимального решения для реального объекта без непосредственного экспериментирования с самим объектом. "Прямой" путь, ведущий к оптимальному решению, заменяется "обходным", включающим построение и оптимизацию модели, а также преобразование полученных результатов в практически реализуемую форму. Очевидно, что такой подход к оптимизации объекта обязательно требует использования некоторого упрощенного представления реального объекта. При формировании такого приближенного представления или модели следует учитывать только важнейшие характеристики объекта, которые должны быть отражены в модели, а менее существенные особенности в модель можно не включать. Необходимо также сформулировать логически обоснованные допущения, выбрать форму представления модели, уровень ее детализации и метод реализации на ЭВМ. Указанные соображения относятся к этапу построения модели и являются в той или иной мере произвольными. Модели можно упорядочить по степени адекватности описания поведения реального объекта в представляющей интерес области эксплуатации. Таким образом, качество модели нельзя оценивать ни по структуре, ни по форме. Единственным критерием такой оценки может служить лишь достоверность полученных на модели примеров поведения реального объекта.

В то же время адекватность модели часто невозможно строго оценить и поэтому выбор той или иной модели в значительной степени субъективен. Так, например, одна модель может оказаться более точной, чем другая, в определенном диапазоне изменения переменных, но менее точной в другом диапазоне.

Следует отметить, что соответствие модели реальному объекту носит в лучшем случае правдоподобный характер. Поскольку модель по своей сути не более чем упрощение реальных соотношений, то не существует абсолютных примеров, с помощью которых можно было бы ранжировать модели. Всегда есть ситуации, требующие субъективной оценки и предвидения того, как поведет себя реальный объект. Как следствие очень важно, чтобы создатель модели детально знал моделируемую систему, понимал технические принципы, лежащие в основе модели, а в случае оптимизации проекта сам руководил вычислениями, необходимыми для получения практически реализуемого проекта.

Работа по созданию модели является самым дорогим этапом оптимизационного исследования, так как она требует привлечения компетентных специалистов, хорошо знающих предметную область и изучаемый объект. Поскольку стоимость создания моделей резко возрастает по мере их детализации, необходимо тщательно продумывать уровень детализации, чтобы он соответствовал целям исследования и отвечал качеству доступной информации об объекте.

В оптимизационных исследованиях обычно используются модели трех основных типов: 1) аналитические; 2) модели поверхности отклика (регрессионные); 3) имитационные.

Вычислительные трудности, связанные с решением задачи, обычно вызываются четырьмя основными причинами: плохим масштабированием, несоответствием программ для вычисления значений функции и программ для вычисления производных, недифференцируемостью входящих в модель функций, неправильным заданием области определения значений аргументов функций. Только при тщательном анализе модели можно выявить эти ситуации и исключить их путем простой модификации модели.

В результате масштабирования осуществляется переход к относительным значениям величин, используемых в модели. В идеальном случае все переменные модели масштабируются таким образом, чтобы их значения находились в интервале  $0,1 - 10$ . Таким же образом по оценкам ограничений в приближенном решении исследуется чувствительность ограничений к изменениям значений переменных. Для этого вычисляется матрица, составляемая из градиентов ограничений. Наилучший случай, когда все ограничения имеют почти одинаковую чувствительность к изменениям значений переменных и значе-

ния градиентов ограничений находятся внутри одного и того же интервала значений. Благодаря этому невязки ограничений получают одинаковые веса и матричные операции с якобианом ограничений не приводят к потере точности вычислений.

Для надежной оптимизации объектов, целевые функции которых могут иметь несколько локальных минимумов, следует воспользоваться несколькими методами решения задачи, чтобы найти глобальный минимум. Отыскать глобальный минимум желательно не только в связи с тем, что это лучшее возможное решение задачи, но также и потому, что локальный минимум может привести к неправильным оценкам результатов расчетов по определению влияния переменных модели. Методы поиска глобального оптимума являются в настоящее время предметом интенсивных исследований. Известные методы поиска делятся на детерминированные и стохастические, которые в свою очередь могут быть эвристическими и строго обоснованными. Простейший и наиболее широко используемый метод состоит в проведении ряда оптимизационных расчетов при различных начальных условиях. В этом методе начальные точки выбираются из определенной решетки или же генерируются случайным образом. В первом случае допустимая область разбивается на непересекающиеся области и оптимизация выполняется каждой такой области по отдельности. Во втором случае начальные точки выбираются случайным образом, считая, что они распределены равномерно. В обоих случаях в качестве глобального оптимума из всех найденных локальных минимумов принимается локальный минимум с минимальным значением целевой функции. Оба этих метода эвристические. Теоретически, обратные методы глобальной оптимизации разработаны только для задач со специальной структурой.

Оптимизационные исследования не заканчиваются получением решения задачи. Напротив, самая важная часть исследования заключается в обосновании правильности решения и анализе его чувствительности. Наиболее важным является информация о состоянии объекта в окрестности решения, что позволяет глубже понять его основные свойства. Важнейшими результатами исследования являются ответы на такие вопросы: 1) какие ограничения активны в полученном решении? 2) что составляет основную часть затрат (стоимости)? 3) какова чувствительность решения к изменениям значений параметров?

Активные ограничения указывают на ограниченные возможности объекта или на то, что из-за проектных соображений объект усовершенствовать нельзя. По величине затрат (стоимости) находят тот блок объекта, параметры которого должны быть улучшены. Чувствительность решения к изменению значений параметров указывает на то, какие оценки параметров следует улучшить для того, чтобы безошибочно найти оптимально решение.

Рассмотренную выше стратегию оптимизационного исследования будем применять для решения задачи интегрированного проектирования технологических объектов и систем управления.

Далее остановимся на методах динамической оптимизации технологических объектов. Пусть функционирование управляемого технологического объекта (аппаратура, установки и т.п.) описывается на интервале  $[t_1, t_2]$  дифференциальным уравнением

$$\dot{x}(t) = f(x, u, t), \quad x \in E^n, \quad n \in E^r. \quad (4.15)$$

Будем считать, что область допустимых управлений есть множество всех ограниченных кусочно-непрерывных функций  $u(t)$  на  $[t_0, t_1]$  таких, что  $u \in U$  для любого  $t \in [t_0, t_1]$ , где  $u \in E^r$  – заданное подмножество из  $r$ -мерного евклидова пространства  $E^r$ .

Введем скалярный критерий качества

$$I = V_3(x(t_1), t_1) + \int_{t_0}^{t_1} L(x, u, t) dt, \quad (4.16)$$

где  $L(x, u, t)$  – действительная функция на  $E^n \times E^r \times [t_0, t_1]$  и  $V_3(x(t_1), t_1)$  – действительная функция на  $E^n \times [t_0, t_1]$ .

Будем считать, что функции  $f(x, u, t)$  и  $L(x, u, t)$  непрерывны и дифференцируемы по совокупности переменных  $x, u, t$ . Пусть  $S$  – заданное множество из  $E^n \times [t_0, t_1]$ , назовем  $S$  множеством целей (множеством конечных состояний) и  $V_3(x(t_1), t_1)$  – функцией конечных состояний.

Задачей оптимального управления для системы (4.15) при сделанных предположениях относительно начального состояния  $x(t_0) \in E^n$ , области  $u \in E^r$  допустимых управлений  $u(t) \in U$  и множества конечных состояний  $S$  является отыскание такого управления  $u(t) \in U$ , что функционал (4.16) достигает минимального значения.

Конкретизация выражений  $f(x, u, t)$ ,  $L(x, u, t)$ ,  $V_3(x(t_1), t_1)$  и множества целей  $S$  порождает различные типы задач оптимального управления].

Классическое вариационное исчисление (в случае непрерывности  $u(t)$ ) и принцип максимума Л.С. Понтрягина сводят задачу оптимального управления к решению двухточечной краевой задачи для системы нелинейных дифференциальных уравнений. Принцип максимума применим к задачам с управлением общего вида. В случае описания движения объекта линейными дифференциальными уравнениями общая теория задач оптимального управления, основанная на проблеме моментов, предложена и обоснована Н.Н. Красовским [53].

Характерным для задач оптимального управления является то, что точные аналитические решения удается получить лишь в редких случаях. К этим случаям относятся задачи с линейными объектами и квадратичными функционалами.

Сложность или невозможность получения аналитических результатов для задач в более общей постановке привели к развитию вычислительных и приближенных методов построения оптимального управления [54].

Решение сформулированной выше задачи оптимального управления получают обычно в форме так называемого программного управления, т.е.  $u^* = u^*(t)$ , которое реализуется в разомкнутой системе управления. Применение таких систем управления процессами химической технологии не дает желаемого результата ввиду больших затрат машинного времени для расчета программы управления из-за изменчивости начальных условий и неточности реализации программы в процессе его функционирования. В связи с этим более перспективным направлением в автоматизации и оптимизации динамических режимов процессов химической технологии является синтез систем управления с обратной связью.

Методы аналитического конструирования оптимальных регуляторов (АКОР) позволяют синтезировать оптимальный закон управления (оператор обратной связи в виде  $u^* = \psi(x)$ ) [55 – 58].

Остановимся здесь на модифицированном А.А. Красовским [56] методе аналитического конструирования, который заключается в видоизменении минимизируемого функционала, позволяющим численно получить решение для достаточно сложных нелинейных задач динамической оптимизации. Пусть управляемый процесс описывается дифференциальным уравнением типа

$$\dot{x} = f(x, t) + \varphi(x, t) \cdot u,$$

а минимизируемый функционал имеет вид

$$I = V_3[x(t_1)] + \int_{t_0}^{t_1} Q_3[x(t), t] dt + \int_{t_0}^{t_1} \{U_3[u(t), t] + U_3^*[u^*(t), t]\} dt, \quad (4.17)$$

где  $U_3, U_3^*$  – заданные функции аргументов такие, что  $\left\{ U_3(u, t) + U_3^*(u^*, t) - \left[ \frac{\partial}{\partial u} U_3(u^*, t) \right] u \right\}$  – положительно определенная функция относительно  $u$ , обращающаяся в нуль при  $u = u^*$ . Заметим, что функция  $u^*$  в (4.17) – пока неизвестное оптимальное управление.

В работе [56] показано, что оптимальное управление  $u = u^*$  в данном случае определяется соотношением

$$\frac{\partial U_3(v, t)}{\partial v} = - \frac{\partial V}{\partial x} \varphi(x, t),$$

где  $V = V(x, t)$  есть решение уравнения Ляпунова для неуправляемого ( $u = 0$ ) объекта

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \frac{\partial V}{\partial x} f(x, t) = -Q_3(x, t);$$

при граничном условии

$$V_{t=t_1} = V_3(x).$$

Для случая функционала (4.17) с квадратичной функцией

$$V_3 = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^r \frac{u_j^2 + u_j^{*2}}{k_j^2} dt$$

оптимальным управлением являются функции

$$u_j = u_j^* = -k_j^2 \sum_{i=1}^n \varphi_{ij}(x, t) \frac{\partial V}{\partial x_i}, \quad j = \overline{1, r}. \quad (4.18)$$

Таким образом, оптимальное управление при функционале "обобщенной работы" А.А. Красовского (4.17) имеет такой же внешний вид, как и при классическом функционале. Однако функция  $V = V(x, t)$  здесь есть решение линейного уравнения с частными производными

$$\frac{\partial V}{\partial t} - \sum_{i=1}^n \varphi_j \frac{\partial V}{\partial x_i} = -Q_3, \quad (4.19)$$

при граничном условии

$$V_{t=t_1} = V_3, \quad (4.20)$$

в то время как при классическом функционале  $V = V(x, t)$  есть решение нелинейного уравнения Беллмана. Это принципиальное отличие, сохраняющееся для всех задач оптимального управления по функционалу обобщенной работы, обуславливает широкие возможности для синтеза систем оптимального управления периодическими процессами и пусковыми режимами непрерывных процессов химических производств.

#### 4.3 ПОСТАНОВКИ ЗАДАЧ, МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ ИНТЕГРИРОВАННОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ ПРИ НАЛИЧИИ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ ИСХОДНОЙ ИНФОРМАЦИИ

В этом параграфе рассматриваются: 1) новые постановки одно- и двухэтапных задач стохастического программирования и методы их решения при проектировании гибких технологических объектов; 2) модифицированные алгоритмы решения известных задач оптимизации (одно- и двухэтапных), сформулированных Гроссманном, Пистикополосом и др., характерной чертой которых является требование

безусловного выполнения всех ограничений при всех возможных значениях неопределенных параметров; 3) алгоритмы оптимального управления динамическими режимами и периодическими (полунепрерывными) нелинейными технологическими объектами; 4) применение метода имитационного моделирования для решения одно- и двухэтапных задач оптимизации при интегрированном проектировании.

*Постановки задач и методы решения одно- и двухэтапных задач стохастического программирования.*

При проектировании технологических объектов (систем) всегда следует учитывать ограничения по качеству, производительности аппаратов, безопасности производства, экологической безопасности и др. При этом следует различать "мягкие" (вероятностные) и "жесткие" ограничения. Здесь рассматриваются задачи анализа гибкости объекта и оптимизации с "мягкими" ограничениями. Проблема выполнения ограничений сильно осложняется наличием неопределенности физической, химической, технологической и экономической информации, используемой при проектировании процесса.

Как и ранее, здесь будем использовать следующие обозначения:  $\theta \in T$ ,  $T = \{\theta \mid \theta^L \leq \theta \leq \theta^U\}$ ,  $\theta$  – вектор неопределенных параметров, принадлежащих области  $T$ ; причем  $\theta = \{\theta^1, \theta^2\}$ , где  $\theta^1 \in T_1$  – подвектор компонентов  $\theta$ , которые могут быть с достаточной точностью определены (измерены или идентифицированы) на стадии эксплуатации производства;  $\theta^2 \in T_2$  – подвектор компонентов  $\theta$ , которые не удается

идентифицировать даже на стадии эксплуатации производства;  $\Omega = \{\omega_i \mid i = \overline{1, \rho}\}$  – множество производимых продуктов (ассортимент);  $d \in D$  – вектор проектных (конструктивных) параметров (множество  $D$  определяется типом аппаратного оформления технологического процесса);  $C$  – критерий оптимального проектирования процесса.

Математическая постановка задачи анализа гибкости проектируемого производства при заданных вариантах структуры производства, ассортименте  $\Omega$  выпускаемых продуктов, типов аппаратного оформления технологического объекта может быть сформулирована следующим образом: для фиксированного значения  $d \in D$  требуется подобрать вектор управляющих переменных  $z$  в статике, при которых выполняется условие гибкости:

$$\forall \omega_i \in \Omega \quad \chi(d) = \text{Вер}_\theta \{ \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta) \leq 0 \}, \quad (4.21)$$

где  $\chi(d)$  – соответствует функции гибкости проекта производства с вектором  $d$ .

Заметим, что условие гибкости (4.21) записывается в более "мягкой" форме в отличие от (А).

При  $\chi(d) \geq \rho_{\text{зад}}$  получаем работоспособный проект производства для заданного ассортимента выпускаемой продукции и всей области  $T$  возможных изменений вектора неопределенных параметров  $\theta$ . При  $\chi(d) < \rho_{\text{зад}}$  проект неработоспособен для некоторой области  $T$  и при выпуске определенных продуктов  $\omega_i$  из заданного ассортимента  $\Omega$ .

По аналогии с задачей (Б) сформулируем математическую постановку задачи определения индекса гибкости  $F$  проектируемого производства, описываемого вектором проектных параметров  $d$ :

$$F = \max \delta; \quad (4.22)$$

при ограничениях

$$\chi(d) = \text{Вер}_\theta \{ \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta) \leq 0 \} \geq \rho_{\text{зад}},$$

$$T(\delta) = \{ \theta \mid \theta^N - \delta \Delta \theta^- \leq \theta \leq \theta^N + \delta \Delta \theta^+ \},$$

$$T(F) = \{ \theta \mid \theta^N - F \Delta \theta^- \leq \theta \leq \theta^N + F \Delta \theta^+ \}$$

$$(4.23)$$

где  $\delta$  – неотрицательная скалярная переменная;  $\theta^N$  – номинальное (например, среднее) значение вектора неопределенных параметров;  $\Delta \theta^+$ ,  $\Delta \theta^-$  – ожидаемые отклонения от номинального значения.

Решение задачи (4.21) анализа гибкости проекта приобретает важное значение на ранних стадиях проектирования), когда формируется множество альтернативных вариантов осуществления ХТП. Вычисление индекса гибкости  $F$  становится необходимым для определения возможного расширения ассортимента выпускаемой продукции без реконструкции производства и необходимости увеличения показателей регулируемости объекта по основным каналам управления. Улучшение динамических свойств объекта возможно за счет уменьшения размеров технологического оборудования и снижения времени транспортного запаздывания в объекте. Чем меньше индекс гибкости проекта, тем точнее должна быть задана исходная информация, и это приводит к наименьшим капитальным затратам при оптимальном проектировании технологических объектов (систем).

Для решения задач анализа гибкости проекта в постановке (4.21) и вычисления индекса гибкости в постановке (4.22), (4.23) будем использовать теорию А-задач стохастического программирования, разработанную В.И. Бодровым [59]. В соответствии с положениями этой теории функцию, записанную в фигурных скобках (4.21)

$$\psi(d, \theta) = \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta),$$

можно представить в форме стандартной задачи математического программирования

$$\psi(d, \theta) = \min_{z, \alpha} \alpha; \quad (4.24)$$

при ограничениях

$$g_j(d, z, \theta) \leq \alpha, \quad j \in J, \quad (4.25)$$

где  $\alpha$  – скалярная переменная.

Если функции  $g_j(d, z, \theta)$  – нелинейные по  $z$ , то задача (4.24), (4.25) представляют собой задачу нелинейного программирования.

С учетом преобразования (4.24), (4.25) задачу анализа гибкости проекта (4.21) можно записать в следующем виде

$$\psi(d, \theta) = \min_{z, \alpha} \alpha \quad (4.26)$$

при ограничениях

$$\left. \begin{array}{l} g_j(d, z, \theta) \leq \alpha, \quad j \in J; \\ \text{Вер}_\theta \{ g_j(d, z, \theta) \leq 0 \} \geq \rho_{\text{зад}} \end{array} \right\} \quad (4.27)$$

В соответствии с методологией решения А-задач стохастического программирования нами предлагается следующий алгоритм решения задачи (4.26), (4.27).

### Алгоритм 1.

*Шаг 1.* Положим  $\nu = 0$  и зададим начальные значения величин  $\alpha^{(\nu)}$ ,  $z^{(\nu)}$  и  $\theta^N$ .

*Шаг 2.* Методом нелинейного программирования решаем задачу

$$\psi(d, \theta^N) = \min_{z, \alpha} \alpha,$$

при ограничениях

$$g_j(d, z, \theta^N) \leq \alpha, \quad j \in J.$$

и определяем  $z_{\hat{\alpha}}$ ,  $\hat{\alpha}$  – решение задачи НЛП.

*Шаг 3.* При фиксированном значении  $z = z_{\hat{\alpha}}$  проверяем выполнение условий

$$\text{Вер}_\theta \{ g_j(d, z_{\hat{\alpha}}, \theta) \leq 0 \} \geq \rho_{\text{зад}} \quad (4.28)$$

*Шаг 4.* Если для представительной выборки значений  $\theta$  из области  $T$  вероятностные ограничения выполняются, то проект, определяемый вектором  $d$ , является гибким и его можно рекомендовать для дальнейшей проработки. В противном случае условие гибкости для проекта с вектором  $d$  не выполняется и он отвергается.

Подобная процедура может быть применена и для расчета индекса гибкости проекта при решении задачи (4.22), (4.23).

Перейдем к рассмотрению задачи оптимального проектирования, в которой конструктивные переменные  $d$  и режимные (управляющие) переменные должны быть выбраны таким образом, чтобы минимизировать приведенные затраты, включающие стоимость реализуемого проекта (капитальные затраты) и эксплуатационные затраты.

Эксплуатационные затраты включают в себя следующие виды затрат: 1) на сырье и материалы; 2) на потребляемую оборудованием электро- и тепловую энергию; 3) на заработную плату обслуживающего персонала; 4) на социальные нужды; 5) на содержание и эксплуатацию технологического оборудования.

Отметим, что основной составляющей эксплуатационных затрат являются затраты на сырье и энергию. Поэтому, при минимизации этой составляющей затрат при проектировании технологических процессов, аппаратов и системы управления фактически добиваются энерго- и ресурсосбережения при создании нового химического производства. Особенно это важно при проектировании многопродуктовых химических производств.

При проектировании химических производств необходимо учитывать гибкость (работоспособность) проекта. При этом у нас есть два выбора:

1) убедиться в гибкости проекта при найденном векторе  $d^*$  в задаче оптимального проектирования, т.е. показать, что  $\chi(d^*) \leq 0$ ;

2) максимизировать меру гибкости и в то же время минимизировать стоимость проекта.

Для сформулированной задачи оптимизации при наличии неопределенности исходной информации необходимо определить форму целевой функции и ограничений. В основе этого лежит концепция двух этапов "жизни" химического производства: этапа проектирования и этапа эксплуатации.

Формулировку условия гибкости (задающего ограничения задачи) определяют следующие факторы.

1 Характер информации, содержащей неопределенность. Неопределенность может быть параметрической или модельной. В первом случае известна форма математической модели, но неизвестны точные значения некоторых ее параметров. Во втором случае предполагают, что нет точного знания о модели технологического объекта. Имеется ряд альтернативных моделей, одна из которых соответствует действительности.

2 Существование и величина неопределенности информации на втором этапе (на первом этапе неопределенность присутствует практически всегда). Возможны следующие случаи: 1) на этапе эксплуатации все параметры могут быть определены точно в каждый момент времени (либо прямым измерением, либо в результате решения обратной задачи на основе информации, полученной в результате измерений); 2) на этапе эксплуатации область неопределенных параметров та же, что и на этапе проектирования; 3) на этапе эксплуатации некоторые из параметров  $\theta_i$  могут быть определены точно, другие имеют такой же интервал, что и на этапе проектирования; 4) на этапе эксплуатации все параметры  $\theta_i$  содержат неопределенность, но их интервалы неопределенности меньше, чем соответствующие интервалы на этапе проектирования.

3 Способ обеспечения гибкости технологического объекта:

- имеются конструктивные и управляющие переменные;
- имеются только конструктивные переменные;
- имеются только управляющие переменные.

4 Тип ограничений: ограничения могут быть "жесткими" и "мягкими" (вероятностными). Жесткие ограничения не должны нарушаться ни при каких условиях. Мягкие ограничения должны выполняться с заданной вероятностью. В нашей работе мы будем рассматривать следующие случаи:

- все ограничения являются "жесткими";
- все ограничения являются "мягкими";
- часть ограничений является – "жесткими", другая часть – "мягкими".

Большинство реальных задач относится к третьему случаю. Например, ограничения по безопасности производства относятся к разделу "жестких", а ограничения на производительность и селективность часто могут быть отнесены к разделу "мягких".

Отметим, что при формулировании задачи оптимального проектирования важным является требование согласованности  $d$ , и  $z$  в критериях для двух этапов (требование реализуемости режимов).

Сформулируем задачи оптимального проектирования технологического объекта (системы) при наличии неопределенности исходной информации [59, 65 – 67].

**Задача 1.** Имеются конструктивные и управляющие переменные. На этапе эксплуатации процесса область неопределенных параметров та же, что и на этапе проектирования. В этом случае задача оптимального проектирования формулируется следующим образом: для заданного ассортимента  $\Omega$  выпускаемой продукции требуется определить векторы конструктивных параметров  $d^*$  технологического оборудования и режимных (управляющих) переменных  $z^*$  такие, что

$$C(d^*, u^*) = \min_{d, u} M_{\theta} \{ C(d, z, y(d, z, \theta), \theta) \}; \quad (4.29)$$

при связях в форме уравнений математической модели ХТП

$$y = \mathfrak{Z}(d, z, \theta) \quad (4.30)$$

и ограничениях

$$\text{Вер}_{\theta} \{ g_j(d, u, y(d, u, \theta)) \leq 0 \} \geq \rho, \quad j \in J. \quad (4.31)$$

Сформулированная задача (4.29) – (4.31) носит название одноэтапной задачи оптимизации.



Перепишем задачу (4.29) – (4.31) в терминах А-задач стохастического программирования: требуется найти  $m$ -мерный вектор постоянных величин  $\alpha^* = (\alpha_1^*, \alpha_2^*, \dots, \alpha_m^*)$ , векторы конструктивных  $d_{\alpha^*}$  и управляющих  $z_{\alpha^*}$  переменных такие, что

$$C(d_{\alpha^*}, z_{\alpha^*}) = \min_{\alpha \in A} \left\{ \min_{d, z} \sum_{k=1}^K \gamma_k C(d, z, \theta^k) \mid g_j(d, z, \theta) \leq \alpha_j, j \in J \right\}, \quad (4.32)$$

$$\text{где } A = \{ \alpha \mid \forall_j, \text{Вер}_\theta [g_j(d_{\alpha}, z_{\alpha}, \theta) \leq 0] \geq \rho \}, \quad (4.33)$$

где  $\gamma_k$  – веса, которые присвоены каждой точке  $\theta^k$ ,  $\sum_{k=1}^K \gamma_k = 1$ . Весовые коэффициенты могут быть интерпретированы как вероятности того, что вектор неопределенных параметров  $\theta$  принимает значения  $\theta^k$ ,  $\bar{\theta} = \int_T \theta P(\theta) \mid_{d, z} d\theta$ ,  $P(\theta)$  – плотность распределения случайной величины  $\theta$ .

Идея такого подхода, в сущности, очень проста. Поясним ее на примере одномерной задачи стохастического программирования с одним ограничением  $g(z, \theta) \leq 0$ . На рис 4.4, а заштрихована недопустимая область ограничения. Пусть соотношение между целевой функцией  $M_\theta \{C(z, \theta)\}$  и  $g(z, \theta)$  такое, как показано на рис. 4.4, б. Следует заметить, что такое соотношение (кроме, конечно, экзотических случаев) в оптимизационных задачах химической технологии бывает всегда, т.е. наиболее предпочтительные значения целевой функции лежат в недопустимой области (рис. 4.4), поскольку в противном случае ограничение было бы неактивным и его не следовало бы учитывать. В этом случае решение  $z'$  традиционной задачи оптимизации достигается при  $g(z', \bar{\theta}) = 0$ . Очевидно, при реализации этого решения  $z'$  значения  $g(z', \theta)$  будут иметь случайный разброс вследствие наличия случайной величины  $\theta$ . На рис 4.4, в показан этот разброс, который может имитироваться на вероятностной модели  $\zeta(z', \theta)$ .

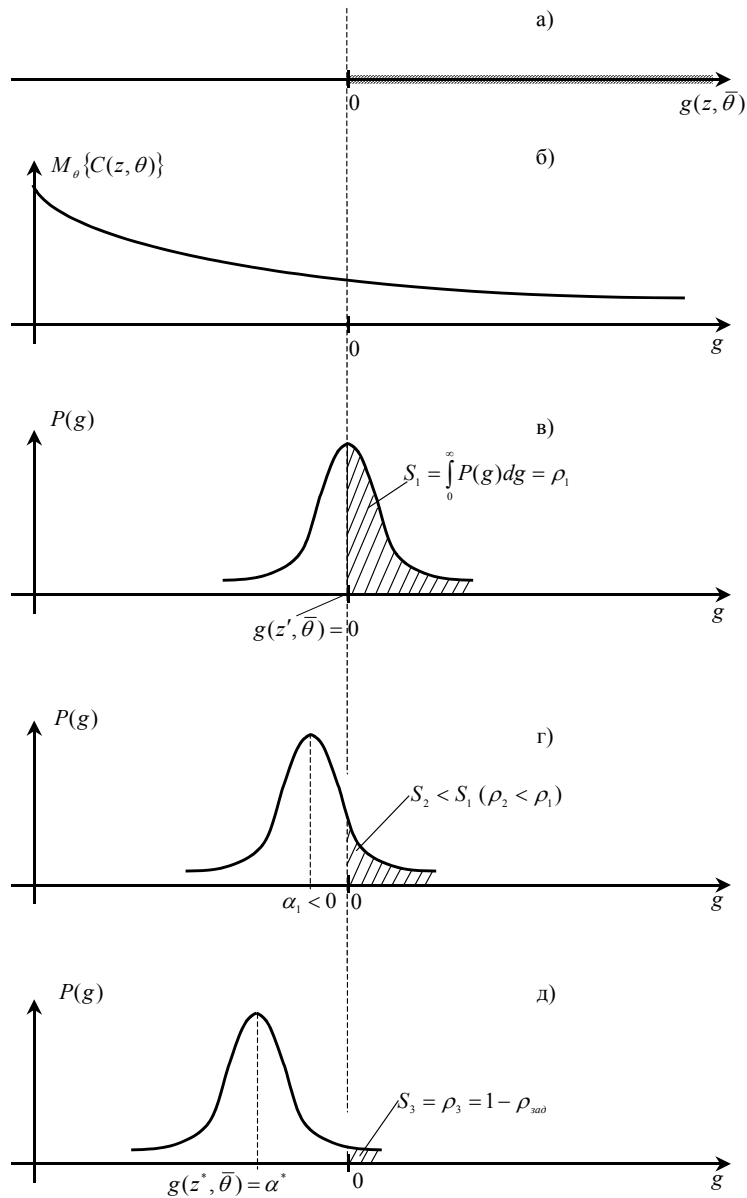
В зависимости от вхождения случайной величины в функцию  $g(z', \theta)$  закон распределения этой функции может изменяться. Следовательно, эта вероятность может быть как меньше, так и больше 0,5. Таким образом, при решении традиционной задачи при  $\theta = \bar{\theta}$  мы даже не знаем, какова вероятность нарушения технологических ограничений.

В сформулированной выше задаче стохастической оптимизации мы требуем, чтобы эта вероятность была меньше, чем некоторая заданная величина  $1 - \rho_{\text{зад}}$ , где  $\rho_{\text{зад}}$  – заданное значение вероятности выполнения ограничений.

Идея А-задач стохастического программирования заключается в следующем: исходное ограничение задачи заменяется на ограничение вида  $g(z, \alpha) \leq \alpha$ , где  $\alpha < 0$ , т.е. исходное ограничение как бы ужесточается (рис. 4.4, з). После этого решается детерминированная задача оптимизации с новыми ограничениями

$$\min_z \{ C(z, \bar{\theta}) \mid g(z, \theta) \leq \alpha_1 \}.$$

При этом решение задачи  $z''$  будет соответствовать тому, что технологические ограничения  $g(z'', \bar{\theta})$  будет равным  $\alpha_1$  (рис. 4.4, з). Соответственно, вероятность нарушения ограничения уменьшается по сравнению с  $\rho_1$ , т.е.  $\rho_2 < \rho_1$ , а значение целевой функции возрастает (рис. 4.4, б). Таким образом, мы приблизились к оптимальному решению задачи, которое изображено на рис. 4.4, д. Отметим, что при выполнении



**Рис. 4.4** Геометрическая иллюстрация идеи решения А-задачи стохастической оптимизации

этой процедуры мы не вычисляли вероятность выполнения (нарушения) ограничения на каждом шаге поиска  $z^*$ . Вычисление  $Вер_0[ g(z, \theta) \leq 0 ]$  производится в оптимальной точке  $z^*$  для того, чтобы проверить выполнение условия  $Вер_0[ g(z, \theta) \leq 0 ] \geq \rho_{зад}$ . В том случае, если эти условия не выполняются, выбирается новое число  $\alpha_2 < \alpha_1 < 0$  и вновь решается детерминированная задача оптимизации с ограничением  $g(z, \bar{\theta}) \leq \alpha_2$ . Процедура продолжается до тех пор, пока не будет найдено такое  $\alpha^*$ , при котором технологическое ограничение  $g(z, \theta) \leq 0$  выполняется с заданной вероятностью т.е.  $Вер_0[ g(z, \theta) \leq 0 ] \geq \rho_{зад}$  или  $\rho_3 \leq 1 - \rho_{зад}$ .

Следует заметить, что возможность применения метода А-задач стохастического программирования должна всегда доказываться либо аналитическим доказательством выполнения достаточных условий, либо вычислительным экспериментом, подтверждающим выполнение достаточных условий.

В данном исследовании мы опираемся на результаты наших работ [59, 60], в которых сформулированы достаточные условия, которым должны удовлетворять функции  $g_j(d, z, \bar{\theta})$ ,  $Вер_0[ g_j(d, z, \theta) \leq 0 ]$  и при выполнении которых решение задачи (4.32), (4.33) –  $(d_{\alpha^*}, z_{\alpha^*}, C(d_{\alpha^*}, z_{\alpha^*}))$  – будет являться решением задачи (4.29) – (4.31).

В соответствии с методом А-задач стохастической оптимизации нами разработан следующий алгоритм решения задачи (4.32), (4.33) [59].

## Алгоритм 2.

*Шаг 1.* Задается начальное значение  $\nu = 0$  и вектора  $\alpha^{(\nu)} = (\alpha_1^{(\nu)}, \alpha_2^{(\nu)}, \dots, \alpha_m^{(\nu)})$ .

*Шаг 2.* Методом последовательного квадратичного программирования решается задача НЛП

$$C(d_\alpha, z_\alpha) = \min_{d, z} \sum_{k=1}^K \gamma_k C(d, z, y(d, z, \theta^k)); \quad (4.34)$$

при связях

$$y = \mathfrak{Z}(d, z, \theta^k); \quad (4.35)$$

и ограничениях

$$g_j(d, z, y(d, z, \theta^k)) \leq \alpha_j^{(\nu)}, \alpha_j^{(\nu)} < 0, j \in J, k = \overline{1, K}. \quad (4.36)$$

*Шаг 3.* В точке  $(d_{\alpha^{(0)}}, z_{\alpha^{(0)}})$ , которая является решением задачи (4.34) – (4.36), вычисляются вероятности выполнения ограничений с использованием имитационной модели

$$y = \mathfrak{Z}(d, u, \theta)$$

и проверяется выполнение условий

$$\text{Вер}_\theta \{ g_j(d, u, y) \leq 0 \} \geq \rho, j \in J.$$

*Шаг 4.* Если вероятностные ограничения не выполняются, т.е.  $\alpha^{(\nu)} \notin \Lambda$ , включается алгоритм входа в допустимую область  $\Lambda$ . Простейшим алгоритмом такого типа является уменьшение  $\alpha_j^{(\nu)}$  для нарушенных ограничений. Далее число  $\nu$  увеличивается на 1, т.е.  $\nu = \nu + 1$  и следует переход к шагу 2.

*Шаг 5.* Если вероятностные ограничения выполняются, то вектор  $\alpha^*$  находим из решения внешней  $\Lambda$ -задачи оптимизации

$$C(d_{\alpha^*}, z_{\alpha^*}) = \min_{\alpha \in \Lambda} C(d_\alpha, z_\alpha). \quad (4.37)$$

В общем случае задача (4.37) может быть решена подходящим методом нелинейного программирования. Однако нами применялись простейший алгоритм коррекции вектора  $\alpha \in \Lambda$  путем увеличения его компонентов на величину

$$\Delta \alpha_j = \lambda^{(\nu)} (\text{Вер}_\theta [g_j(\bullet) \leq 0] - \rho),$$

где  $\lambda^{(\nu)}$  – шаг коррекции на  $\nu$  – ой итерации, подбираемый опытным путем. Поиск  $\alpha^*$  прекращается, если  $\Delta \alpha_j$  для  $\forall_j$  становится меньше заранее заданного малого числа  $\varepsilon$  (точность поиска  $\alpha^*$ ).

Вычисление вероятностных интегралов производится стандартными методами (Монте-Карло, на аппроксимирующей сетке).

**Задача 2.** Имеются конструктивные и управляющие переменные. На этапе эксплуатации неопределенные параметры могут быть определены в некоторый момент времени и управляющие переменные могут быть использованы для обеспечения выполнения ограничений.

Для этого случая использовать в качестве критерия выражение  $M_\theta \{ C^*(d, \theta) \}$ , где  $C^*(d, \theta) = \min_z C(d, z, \theta) \mid g_j(d, z, \theta) \leq 0, j \in J$ , которое мы применяли для задачи с жесткими ограничениями, нельзя. Это связано с тем, что сам вид этого критерия предполагает выполнение всех ограничений при всех  $\theta$  из заданной области, т.е. жестким образом. Построим для этого случая критерий оптимизации. Обозначим через  $\hat{T}$  множество значений  $\theta$  из заданной области, при которых могут быть выполнены ограничения задачи и  $\text{Вер}_\theta [\theta \in \hat{T}] \geq \rho_{\text{зад}}$ . Тогда в критерии оптимизации для исходного  $\theta \in \hat{T}$  переменную

$z$  следует выбирать из условия минимума  $C(d, z, \theta)$  при условии выполнения ограничений  $g_j(d, z, \theta) \leq 0, j \in J$ , а при  $\theta \notin \hat{T}$  либо просто из условия минимизации  $C(d, z, \theta)$ , либо из условия минимизации функции, учитывающей величину  $C(d, z, \theta)$  и штраф за нарушение ограничений  $g_j(d, z, \theta) \leq 0$ .

При этом будем использовать следующие обозначения:

$$\hat{C}(d, z, \theta) = C(d, z, \theta) + A \max \left( \max_{j \in J^*} g_j(d, z, \theta), 0 \right), \quad j \in J^*, \quad (4.38)$$

где  $A$  – штрафной коэффициент;  $J^*$  – множество индексов ограничений, за нарушение которых берется штраф.

В этом случае задача оптимального проектирования может быть записана следующим образом:

$$\min_d C(d) = \min_d (C_1(d) + C_2(d)),$$

$$C_1(d) = \int_{\hat{T}} \left( \min_z C(d, z, \theta) \mid g_j(d, z, \theta) \leq 0, j \in J \right) P(\theta) d\theta; \quad (4.39)$$

$$C_2(d) = \int_{T \setminus \hat{T}} \left( \min_z \hat{C}(d, z, \theta) \right) P(\theta) d\theta,$$

где  $\hat{C}(\bullet)$  определяется из (4.38) при  $j \in J^*$ ;

$$\hat{T} = \hat{T}(d) = \left\{ \theta : \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta) \leq 0, \theta \in T \right\}, \quad (4.40)$$

$$\text{Вер}[\theta \in \hat{T}] \geq \rho_{\text{зад}}. \quad (4.41)$$

Отметим, что если существует такое  $d$ , что  $\max_{\theta \in T} \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta) \leq 0$  при  $\rho_{\text{зад}} \rightarrow 1$  имеем  $\hat{T} \rightarrow T$  и в пределе при  $\rho_{\text{зад}} = 1$  задача (4.39) – (4.41) переходит в двухэтапную задачу с жесткими ограничениями.

Решение двухэтапной задачи оптимизации (4.39) – (4.41) гораздо сложнее одноэтапной задачи (4.29) – (4.31) и для ее решения также будем использовать метод дискретизации критерия для получения дискретного аналога задачи (4.39) – (4.41). С помощью квадратурной формулы функцию

$$M_\theta \left\{ C^*(d, \theta) = \min_z C(d, z, \theta) \mid g_j(d, z, \theta) \leq 0, j \in J \right\}$$

можно приближенно заменить на функцию

$$M_\theta \left\{ C^*(d, \theta) \right\} = \sum_{i \in I_1} \gamma_i C^*(d, \theta^i),$$

где  $\theta^i$  – аппроксимационные точки;  $I_1$  – множество индексов аппроксимационных точек.

Обозначим через  $z^i$  значение вектора  $z$ , являющиеся решением задачи

$$C^*(d, \theta) = \min_z C(d, z, \theta) \mid g_j(d, z, \theta) \leq 0, j \in J,$$

при  $\theta = \theta^i$ .

Тогда

$$\sum_{i \in I_1} \gamma_i C^*(d, \theta^i) = \sum_{i \in I_1} \gamma_i \min_{z^i} \left\{ C(d, z^i, \theta^i) \mid g_j(d, z^i, \theta^i) \leq 0, j \in J \right\}. \quad (4.42)$$

Поскольку под знаком суммы задачи оптимизации зависят каждая от своих поисковых переменных, операции суммирования и минимизации можно поменять местами, и задача (4.39)-(4.41) может быть представлена в следующем виде

$$\min_d \left\{ \sum_{i \in I_1} \min_{z^i} \left[ C(d, z^i, \theta^i) \mid g_j(d, z^i, \theta^i) \leq 0, j \in J \right] + \sum_{l \in I_2} \min_{z^l} \left[ C(d, z^l, \theta^l) + A \max \left( \max_{j \in J^*} g_j(d, z, \theta), 0 \right), j \in J \right] \right\},$$

$$\text{Вер}[\theta \in \hat{T}] \geq \rho_{\text{зад}}.$$

или

$$\min_{d, z^i, z^j, i \in I_1, l \in I_2} \left\{ \sum_{i \in I_1} [C(d, z^i, \theta^i)] + \sum_{l \in I_2} [C(d, z^l, \theta^l) + A \max_{j \in J} (g_j(d, z, \theta), 0)] \right\}; \quad (4.43)$$

при ограничениях

$$g_j(d, z^i, \theta^i) \leq 0, \quad j \in J, \quad i \in I_1; \quad (4.44)$$

и

$$\text{Вер}[\theta \in \hat{T}] \geq \rho_{\text{зад}}. \quad (4.45)$$

Решение сформулированной задачи возможно с использованием эффективных методов решения задач нелинейного программирования и имитационного моделирования.

Нами разработан алгоритм решения задачи (4.42) – (4.45), базирующийся на методе имитационного моделирования [59].

**Задача 3.** Имеются конструктивные и управляющие переменные. Вектор неопределенных параметров состоит из двух подвекторов  $\theta^1$  и  $\theta^2$  ( $\theta = (\theta^1, \theta^2)$ ). В подвектор  $\theta^1$  входят параметры, которые могут быть только определены на стадии эксплуатации процесса, в подвектор  $\theta^2$  – параметры, имеющие неопределенности на этапе эксплуатации те же, что и на этапе проектирования. Пусть при этом  $\theta^1 \in T^1$  и  $\theta^2 \in T^2$ .

Эта задача в большей степени соответствует реальным задачам проектирования, поскольку внешние случайные факторы всегда будут иметь место не только на стадии проектирования, но и на стадии эксплуатации производства. Математическая постановка задачи имеет вид:

$$\begin{aligned} & \min_d \left\{ \int_{\hat{T}} \left( \min_z M_{\theta^2} (C(d, z, \theta^1, \theta^2) \mid \text{Вер}_{\theta^2} [g_j(d, z, \theta^1, \theta^2) \leq 0] \geq \rho_{\text{зад}}, j \in J) \times \right. \right. \\ & \times P(\theta^1) d\theta^1 + \int_{T \setminus \hat{T}} \min_z M_{\theta^2} (C(d, z, \theta^1, \theta^2) + \\ & \left. \left. + A \max_{j \in J} (\rho_{\text{зад}} - \text{Вер}_{\theta^2} (g_j(d, z, \theta^1, \theta^2) \leq 0); 0) \right) P(\theta^1) d\theta^1, \right. \end{aligned} \quad (4.46)$$

$$\left. \hat{T} = \left\{ \theta^1 : \min_z \max_{j \in J} [\rho_{\text{зад}} - \text{Вер}_{\theta^2} [g_j(d, z, \theta^1, \theta^2) \leq 0] \leq 0, \theta^1 \in T^1] \right\}, \right. \quad (4.47)$$

где  $A$  – штрафной коэффициент;  $J^*$  – множество индексов ограничений, за нарушение которых берется штраф.

Здесь также отметим, что если существует  $d \in D$ , при котором

$$\max_{\theta^1 \in T^1} \min_z \max_{j \in J} (\rho_{\text{зад}} - \text{Вер}_{\theta^2} [g_j(d, z, \theta^1, \theta^2) \leq 0]) \leq 0,$$

то существует  $\{d\} \neq \emptyset$ , при котором  $\hat{T} = T$  и  $\int_{T \setminus \hat{T}} \min_z M_{\theta^2} (\bullet) P(\theta^1) d\theta^1 = 0$ .

При этом сформулированная задача (4.46), (4.47) переходит в двухэтапную задачу с жесткими ограничениями.

**Задача 4.** Имеются конструктивные и управляющие переменные. На этапе эксплуатации ХТП область неопределенных параметров та же, что и на этапе проектирования. Этот случай соответствует задаче проектирования ХТП, когда на этапе эксплуатации область неопределенных параметров не может быть уточнена.

Эта задача может быть сформулирована (в отличие от задачи 1) следующим образом):

$$C^* = \min_{d, z} M_{\theta} \{C(d, z, \theta)\},$$

при условии

$$\max_{\theta} \max_j g_j(d, z, \theta) \leq 0$$

или

$$\max_{\theta} g_j(d, z, \theta) \leq 0, j \in J.$$

Упростим сформулированную задачу. Для этого заменим математическое ожидание с помощью квадратной формулы некоторой суммой

$$M_{\theta} \{C(d, z, \theta)\} \approx \sum_{i \in I_1} v_i C(d, z, \theta^{(i)}),$$

где  $v_i$  – весовые коэффициенты,  $\sum_{i \in I_1} v_i = 1$ ,  $I_1$  – множество аппроксимационных точек в области  $T$ .

Совокупность точек  $\theta^{(i)}, i \in I_1$ , будем обозначать через  $S_1$ , а множество критических точек на  $v$ -ом шаге – через  $S_2^{(v)} = \{\theta^{(j)} : j \in I_2^{(v)}\}$ .

### Алгоритм 3.

*Шаг 1.* Положим  $v = 0$ . Выбираем совокупность аппроксимационных точек  $S_1$  и начальную совокупность критических точек  $S_2^{(v)}$ .

*Шаг 2.* Решаем задачу

$$\min_{d, z} \sum_{i \in I_1} \gamma_i C(d, z, \theta^{(i)});$$

$$g_j(d, z, \theta^{(i)}) \leq 0, j = \overline{1, m}; i \in I_2^{(v)}$$

и определяем  $d^{(v)}, z^{(v)}$ .

*Шаг 3.* Решаем  $m$ -задач

$$\max_{\theta \in T} g_i(d^{(v)}, z^{(v)}, \theta^i), j = \overline{1, m}$$

и определяем  $m$  точек  $\theta^{(i)*}, i = \overline{1, m}$ .

*Шаг 4.* Образует множество

$$R^{(v)} = \{\theta^{(i)*} : g_j(d^{(v)}, z^{(v)}, \theta^{(i)*}) > 0\}.$$

Если это множество пустое, то решение задачи получено. В противном случае перейдем к шагу 5.

*Шаг 5.* Определим

$$S_2^{(v+1)} = S_2^{(v)} \cup R^{(v)}.$$

Положим  $v = v + 1$  и переходим к шагу 2.

Характерной чертой алгоритма 3 является увеличение числа критических точек на каждом шаге, соответственно увеличивается число ограничений. Это является определенным недостатком, поскольку в некоторых случаях при большом числе критических точек число ограничений может стать слишком большим.

Остановимся подробнее на шаге 3. Как правило, характер функций  $g_j$  неизвестен. В этом случае можно использовать такой подход. Предполагаем на первом этапе, что функции  $g_j$  выпуклы. В этом случае решение задачи

$$\max_{\theta \in T} g_i(d^{(v)}, z^{(v)}, \theta^i), j = \overline{1, m}.$$

находится в одной из вершин параллелепипеда  $T$  [42]. В начальное множество критических точек  $S_2^{(0)}$  включается некоторое количество угловых точек куба  $T$ , а на шаге 3 рассчитываются значения функций  $g_j(d^{(v)}, z^{(v)}, \theta^i), j = \overline{1, m}$  во всех угловых точках куба  $T$ , не принадлежащих множествам  $S_2^{(v)}$  и  $S_1$ . Сре-

ди этих точек выбираются  $m$  точек, в которых функции  $g_i(d^{(v)}, z^{(v)}, \theta^i)$ ,  $j = \overline{1, m}$  принимают наибольшие значения. Далее определим множество критических точек  $S_2^{(v+1)} = S_2^{(v)} \cup R^{(v)}$  и переходим к шагу 2 алгоритма 2.

**Задача 5.** Имеются конструктивные и управляющие переменные. На этапе эксплуатации неопределенные параметры могут быть определены в каждый момент времени. Для обеспечения выполнения ограничений  $g_i(d, z, \theta) \leq 0$ ,  $j \in J$  могут быть использованы конструктивные и управляющие переменные. Для этого случая условие гибкости (работоспособности) можно записать в виде

$$\forall \theta \in T \exists z, d \forall j \in J [g_j(d, z, \theta) \leq 0]$$

или

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \min_{z, d} \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta) \leq 0.$$

Изменение конструктивных переменных гибкого аппарата на стадии эксплуатации ХТП возможно за счет его модульно-блочной структуры. Тогда оптимизационная задача в условиях неопределенности на стадии проектирования будет иметь вид

$$C^* = M_\theta \left\{ \min_{d, z} C(d, z, \theta) \right\},$$

при условии (4.48).

Используя квадратурную формулу, функцию  $M_\theta \{\bullet\}$  можно приближенно заменить выражением  $M_\theta \{C^*(d, z, \theta)\} \approx \sum_{i \in I_1} v_i C^*(d, z, \theta^i)$ ,

где  $v_i$  – весовые коэффициенты;  $\theta^i$  – аппроксимационные точки;  $I_1$  – множество индексов аппроксимационных точек.

Операции суммирования и минимизации можно поменять местами и задача может быть представлена в следующем виде

$$C^* = \min_{d^i, z^i} \sum_{i \in I_1} v_i C(d^i, z^i, \theta^i),$$

при выполнении условия гибкости и  $g_j(d^i, z^i, \theta^i) \leq 0$ ,  $i \in I_1$ ,  $j \in J$ .

Сформулированная задача также как и задача 4 относится к одноэтапным задачам оптимизации и может быть решена с помощью алгоритма 3.

**Задача 6.** Формулировка этой задачи та же, что и задачи 2, за исключением того, что условие гибкости (работоспособности) проекта ХТП записывается в логической форме

$$\forall \theta \left\{ \exists z \left( \forall j \in J [g_j(d, z, \theta) \leq 0] \right) \right\}$$

или с учетом эквивалентных соотношений

$$\max_z g(z) \leq 0 \Leftrightarrow \forall z g(z) \leq 0;$$

$$\max_z g(z) \leq 0 \Leftrightarrow \exists z g(z) \leq 0;$$

в виде

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \min_z \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta) \leq 0. \quad (4.48)$$

В сформулированной задаче существенно различаются роли конструктивных  $d$  и технологических переменных  $z$  на двух этапах. Переменные  $d$ , выбранные на этапе проектирования, естественно, остаются неизменными на всем этапе функционирования процесса. С другой стороны, технологические режимные (управляющие) переменные на этапе функционирования могут настраиваться в зависимости от того, какие значения принимают параметры  $\theta$ . Фактически в данном случае решается задача выбора

оптимальных коэффициентов запаса для конструктивных переменных, обеспечивающих выполнение технологических ограничений при любых значениях параметров  $\theta \in T$ . В данном случае также можно считать переменные  $d$  и  $z$  равноправными и, используя одноэтапную стратегию, решить задачу.

Однако это делать невыгодно, поскольку мы неявно предполагаем, что один раз найденные на этапе проектирования режимные переменные остаются затем неизменными независимо от того, какие фактические значения примут параметры  $\theta$ . Это может привести к излишне большим коэффициентам запаса. В то же время использование возможности изменять параметры  $z$  (с помощью системы управления) на этапе функционирования процесса "облегчает" переменным  $d$  удовлетворять ограничениям, что, в свою очередь, позволит уменьшить коэффициенты запаса.

Двухэтапную задачу оптимального проектирования можно записать в виде

$$C^* = \min_d M_\theta \left\{ \min_z C(d, z, \theta) \mid g_j(d, z, \theta) \leq 0, j \in J \right\},$$

при ограничениях (4.48).

Используя прием дискретизации, перепишем последнюю задачу в виде

$$\min_{d, z^{(i)}} \sum_{i \in I_1} v_i C(d, z^{(i)}, \theta^{(i)}), \quad (4.49)$$

$$g_j(d, z^{(i)}, \theta^{(i)}) \leq 0, j = \overline{1, m}; i \in I_1; \quad (4.50)$$

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \min_{z \in Z} \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta) \leq 0.$$

Решение задачи (4.48) – (4.50) прямыми методами не представляется возможным, поскольку вычисление  $\chi(d)$  в каждой точке может привести к очень большим объемам вычислений. В связи с этим здесь будет рекомендована итерационная процедура, основанная на идеях метода "ветвей и границ" [61] и обеспечивающая приближение значений целевой функции (4.49). При этом не требуется непосредственно вычислять величину  $\chi(d)$ .

В дальнейшем нам потребуются следующие два соотношения:

$$\min_x \max_y f(x, y) \geq \max_y \min_x f(x, y); \quad (4.51)$$

$$\max_x \max_y f(x, y) = \max_y \max_x f(x, y), \quad (4.52)$$

где  $x, y$  – векторы дискретных или непрерывных переменных. Последнее соотношение является очевидным.

Введем функцию

$$\varphi(d, z, \theta) = \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta).$$

Тогда величина  $\chi(d)$  имеет вид

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \min_z \varphi(d, z, \theta).$$

В соответствии с соотношением (4.51) имеем

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \min_z \varphi(d, z, \theta) \leq \min_z \max_{\theta \in T} \varphi(d, z, \theta) = \chi^U(d), \quad (4.53)$$

где

$$\chi^U = \min_z \max_{\theta \in T} \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta) = \min_z \max_{j \in J} \max_{\theta \in T} g_j(d, z, \theta).$$

Введем обозначение

$$\hat{\varphi}_j(d, z) = \max_{\theta} g_j(d, z, \theta),$$

отсюда

$$\chi^U(d) = \min_z \max_j \hat{\varphi}_j(d, z).$$

Известно, что задача вычисления  $\chi^U(d)$  может быть сведена к следующей



$$\min_{z, \alpha} \alpha \mid \hat{\phi}_j(d, z) \leq \alpha. \quad (4.54)$$

Из (4.53) следует, что если  $\chi^U(d) \leq 0$ , то  $\chi(d) \leq 0$ . Поэтому условие

$$\chi^U(d) \leq 0$$

является достаточным условием допустимости (работоспособности) проекта, определяемого вектором конструктивных параметров  $d$ .

Для определения величины  $\chi^U(d)$  необходимо решить задачу (4.54), тогда  $\chi^U(d) = \alpha^*$ , где  $\alpha^*$  – оптимальное значение переменных  $\alpha$ .

Аналогично можно показать, что

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \min_{z \in Z} \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta) \geq \chi(d),$$

где

$$\chi^L(d) = \max_{\theta \in T} \max_{j \in J} \min_{z \in Z} g_j(d, z, \theta) = \max_{j \in J} \max_{\theta \in T} \min_{z \in Z} g_j(d, z, \theta).$$

Отсюда следует, что если

$$\chi^L(d) \geq 0,$$

то и  $\chi(d) \geq 0$ . Поэтому это условие является достаточным условием недопустимости (неработоспособности) проекта с вектором  $d$ . Для определения  $\chi(d)$  необходимо решить  $m$  задач вида

$$\max_{\theta \in T} \min_{z \in Z} g_j(d, z, \theta), \quad j \in \overline{1, m}.$$

Каждая из этих задач эквивалентна следующей

$$\max_{\theta, \alpha} \alpha \mid \min_{z \in Z} g_j(d, z, \theta) \leq \alpha.$$

Таким образом, имеем

$$\chi^L(d) \leq \chi(d) \leq \chi^U(d). \quad (4.55)$$

Следовательно, вычислив значения  $\chi^L$  и  $\chi^U$ , получим оценки снизу и сверху величины  $\chi$  – критерия гибкости (работоспособности) Гроссмана.

Проанализируем физический смысл условия

$$\chi^U(d) \leq 0.$$

Будем искать такой вектор  $z$ , который обеспечивает допустимость вектора  $d$  при любых  $\theta$ :

$$\exists z, \forall \theta, \forall_j g_j(d, z, \theta) \leq 0.$$

Таким образом, используя этот критерий, мы ищем единственный вектор  $z$ , который обеспечивает допустимость вектора  $d$  при любых значениях  $\theta$ . Напомним, что в критерии гибкости Гроссмана  $\chi(d)$  каждому значению  $\theta$  соответствует свой вектор  $z$ , обеспечивающий допустимость вектора  $d$ .

Если разность  $\chi^U - \chi^L$  мала, то рассмотренный подход дает возможность оценить гибкость ХТП, в противном случае необходима какая-либо регулярная процедура, позволяющая изменить эту разность. Рассмотрим одну из этих процедур [61, 62]

Разобьем область  $T$  на  $N$  областей  $T_i$ , ( $i = \overline{1, N}$ ). Для каждой области определяем величину

$$\chi_i^U = \min_{z \in Z} \max_{j \in J} \max_{\theta \in T} g_j(d, z, \theta).$$

Для этого необходимо решить задачу

$$\begin{aligned} & \min_{z, \alpha} \alpha, \\ & \max_{\theta \in T_i} g_j(d, z, \theta) \leq \alpha. \end{aligned} \quad (4.56)$$

Определим теперь величину  $\bar{\chi}^U$  следующим образом

$$\bar{\chi}^U = \max_i \min_{z \in Z} \max_{j \in J} \max_{\theta \in T_i} g_j(d, z, \theta).$$

Поскольку  $T_i \subset T$ , то имеет место неравенство

$$\chi_i^U \leq \chi^U,$$

откуда

$$\bar{\chi}^U = \max_i \chi_i^U \leq \chi^U.$$

Далее можно показать, что

$$\chi \leq \bar{\chi}^U \leq \chi^U.$$

Следовательно, получена уточненная верхняя оценка критерия гибкости Гроссмана. Заметим, что чем плотнее покрытие области  $T$ , тем ближе будет  $\bar{\chi}^U$  к  $\chi$ . Однако такой путь может приводить к решению большого числа задач (4.56). В связи с этим рассмотрим другой путь вычисления  $\chi(d)$ . Для этого представим критерий  $\chi(d)$  в виде

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \psi(d, \theta),$$

где

$$\psi(d, \theta) = \min_z \max_j g_j(d, z, \theta).$$

Здесь вычисление  $\chi(d)$  сводится к определению точки  $\theta^*$ , в которой функция  $\psi(d, \theta)$  принимает максимальное значение.

Для определения этой точки воспользуемся процедурой метода "ветвей и границ" [63]. Цель этой процедуры будет состоять в том, чтобы разбивая область  $T$  на все большее число подобластей  $T_i$ , постараться локализовать точку  $\theta^*$ .

Пусть на  $v$ -ом шаге область  $T$  разбита на  $N$  областей  $T_i^{(v)}$ ,  $i = \overline{1, N_v}$ :  $T = T_1^{(v)} \cup T_2^{(v)} \cup \dots \cup T_{N_v}^{(v)}$ . Далее выбирается одна из областей  $T_{k_v}^{(v)}$ , которая в свою очередь разбивается на некоторое число областей. Для простоты будем считать, что область  $T_{k_v}^{(v)}$  делится на две области:  $T_S^{(v+1)}$  и  $T_q^{(v+1)}$  ( $T_{k_v}^{(v)} = T_S^{(v+1)} + T_q^{(v+1)}$ ). В качестве области  $T_{k_v}^{(v)}$  берется та из областей  $T_i^{(v)}$ , ( $i = \overline{1, N_v}$ ), в которой с наибольшей вероятностью находится оптимальная точка  $\theta^*$ .

Вычислим для каждой области  $T_i^{(v)}$  величину  $\chi_i^U$

$$\chi_i^U \geq \max_{\theta \in T_i} \psi(d, \theta).$$

Величина  $\chi_i^U$  является верхней оценкой для значения функции  $\psi(d, \theta)$  внутри области  $T_i^{(v)}$ . Поэтому закономерно в качестве квазиоптимальной области выбрать область  $T_{k_v}^{(v)}$ , для которой величина  $\chi_i^U$  принимает наибольшее значение

$$\chi_{k_v}^U = \max_i \chi_i^U.$$

Для проведения процедуры метода ветвей и границ на каждой итерации необходимо также знать нижнюю границу значения величины  $\chi(d) = \psi(d, \theta^*)$ . Будем вычислять ее следующим образом [64]. Обозначим через  $\theta_i^*$  решение задач (4.56) и найдем

$$\psi(d, \theta_i^*) = \min_z \max_j g_j(d, z, \theta_i^*).$$

Для этого необходимо решить задачу:

$$\min_{z, \alpha} \alpha; \quad (4.57)$$

$$g_j(d, z, \theta_i^*) \leq \alpha, \quad (j = \overline{1, m}).$$

Вычислим  $\psi(d, \theta_i^*)$  для всех областей  $T_i^{(v)}$ ,  $(i = \overline{1, N_v})$ .

Введем величину

$$\chi_{(v)}^L = \max_j \psi(d, \theta_j^*).$$

Очевидно, что

$$\chi(d) = \max_{\theta \in T} \psi(d, \theta) \geq R^{(v)},$$

что и определяет  $R^{(v)}$  как нижнюю границу для максимального значения функции  $\psi(d, \theta)$ . Пусть для некоторой области выполняется соотношение  $R^{(v)} \geq \chi_i^{U(v)}$ , тогда в соответствии с неравенством  $\chi_i^U \geq \max_{\theta \in T_i} \psi(d, \theta)$  имеем  $R^{(v)} \geq \psi(d, \theta), \forall \theta \in T_i^{(v)}$ . Следовательно, точка  $\theta^*$  заведомо не принадлежит области  $T_i^{(v)}$  и в дальнейшем не рассматривается. Процедура прекращается при выполнении соотношения

$$|R^{(v)} - \chi_{k_v}^U| \leq \varepsilon,$$

где  $\varepsilon$  – малая величина.

Если речь идет об оценке гибкости ХТП, а не о вычислении  $\chi(d)$ , то описанная процедура может закончиться раньше, чем выполнится последнее условие. Действительно, пусть на  $v$ -ой итерации выполнится условие

$$\max_i \chi_i \leq 0,$$

тогда

$$\chi_{k_v} \leq 0.$$

Далее, на каждом шаге необходимо найти два значения  $\chi_S$  и  $\chi_q$ , соответствующих областям  $T_S^{(v+1)}$  и  $T_q^{(v+1)}$ , на которые разбивается квазиоптимальная область  $T_{k_v}^{(v)}$ . Для этого потребуется два раза решить задачу (4.56) и кроме того, необходимо найти величины  $\psi(d, \theta_S^*)$  и  $\psi(d, \theta_q^*)$ , дважды решив задачу (4.57) для  $i = S$  и  $i = q$ .

Вернемся теперь к решению задачи (4.58) – (4.60):

$$C_B^* = \min_d M_\theta \left\{ \min_z C(d, z, \theta) \mid g_j(d, z, \theta) \leq 0, j \in J \right\}; \quad (B)$$

$$\chi(d) = \max_\theta \min_z \max_j g_j(d, z, \theta) \leq 0.$$

Используя полученные выше оценки  $\chi^L(d)$ ,  $\chi^U(d)$ , можно получить оценки оптимального значения целевой функции [64]. Действительно, рассмотрим следующие вспомогательные задачи.

$$C_\Gamma^* = \min_d M_\theta \left\{ \min_z C(d, z, \theta) \mid g_j(d, z, \theta) \leq 0, j \in J \right\}; \quad (Г)$$

$$\chi^U(d) \leq 0.$$

$$C_D^* = \min_d M_\theta \left\{ \min_z C(d, z, \theta) \mid g_j(d, z, \theta) \leq 0, j \in J \right\}; \quad (Д)$$

$$\chi^L(d) \leq 0.$$

Задачи (Г) и (Д) отличаются от задачи (В) только тем, что в них ограничение  $\chi(d) \leq 0$  заменено соответственно на ограничения  $\chi^U(d) \leq 0$  и  $\chi^L(d) \leq 0$ . Поскольку имеет место неравенство

$$\chi^L(d) \leq \chi(d) \leq \chi^U(d),$$

то можно записать

$$C_D^* \leq C_B^* \leq C_\Gamma^*,$$

где  $C_B^*$ ,  $C_\Gamma^*$ ,  $C_D^*$  – оптимальные значения целевой функции задач (В), (Г) и (Д), соответственно. Следует отметить, что решение задачи (Г) и (Д) проще, чем решение задачи (В). Если разность  $C_\Gamma^* - C_D^*$  достаточно мала, то в качестве приближенных оптимальных значений конструктивных переменных могут быть приняты значения

$$d_k^{(B)*} = 0,5(d_k^{(\Gamma)*} + d_k^{(D)*}),$$

при условии

$$\chi(d^{(B)*}) \leq 0.$$

Введем еще одну вспомогательную задачу, разбив область  $T$  на  $N$  областей  $T_i$  ( $i = \overline{1, N}$ ) и определяя

$$\chi_i^U(d) = \min_{z \in Z} \max_{j \in J} \max_{\theta \in T} g_j(d, z, \theta).$$

$$C_E^* = \min_d M_\theta \left\{ \min_z C(d, z, \theta) \mid g_j(d, z, \theta) \leq 0, j \in J \right\}; \quad (E)$$

$$\chi_i^U(d) \leq 0, \dots, \chi_N^U(d) \leq 0.$$

Поскольку имеет место неравенство  $\chi(d) \leq \bar{\chi}^U \leq \chi^U(d)$ , то

$$C_B^* \leq C_E^* \leq C_\Gamma^*.$$

Пусть величина  $r(T_i)$  характеризует размер подобласти  $T_i$ . При выполнении условия  $r(T_i) \leq \varepsilon$ , (где  $\varepsilon$  – достаточно малое число), можно получить достаточно хорошее приближение к решению задачи (2.28) – (2.30).

Рассмотрим алгоритм решения задачи (2.28) – (2.30) с помощью задачи (E), в которой разбиение на области  $T_i$  будет проводится более "экономичным" способом. Обозначим через  $T_i^{(v)}$ ,  $i = \overline{1, N^{(v)}}$  подобласти, на которые разбивается область  $T$  на  $k$ -ой итерации.

#### Алгоритм 4 [60].

*Шаг 1.* Положим  $v = 0$ . Выбрать начальное разбиение области  $T$  на подобласти  $T_i^{(v)}$ ,  $i = \overline{1, N^{(v)}}$  и начальное значение  $d^{(v)}$  вектора  $d$ .

*Шаг 2.* Решить задачу (E). Пусть  $C_E^{(v)}$  и  $d^{(v)}$  – оптимальные значения критерия и вектора  $d$ .

*Шаг 3.* Найти множество  $S^{(v)}$  номеров активных ограничений:

$$\chi_i^U(d^{(v)}) = 0, \quad i \in S^{(v)}.$$

Очевидны соотношения

$$\chi_i^U(d^{(v)}) \geq \chi_j^U(d^{(v)}), \quad \forall i \in S^{(v)}, j \neq i.$$

*Шаг 4.* Если множество  $S^{(v)}$  – пустое, то решение задачи (2.28) – (2.30) получено. В противном случае перейти к шагу 5.

*Шаг 5.* Проверить условие

$$r(T_i) \leq \delta, \quad \forall i \in S^{(v)},$$

где  $\delta$  – заранее заданное малое число. Если условие выполняется, то итерационную процедуру закончить, в противном случае перейти к шагу 6.

*Шаг 6.* Разбить каждую область  $T_i^{(v)}$  ( $i \in S^{(v)}$ ) на две подобласти  $T_{i_1}^{(v+1)}$  и  $T_{i_2}^{(v+1)}$  и образовать новое разбиение, исключив из предыдущего разбиения подобласти  $T_i^{(v)}$  ( $i \in S^{(v)}$ ) и добавив новые области  $T_{i_1}^{(v+1)}$ ,  $T_{i_2}^{(v+1)}$  ( $i \in S^{(v)}$ ).

*Шаг 7.* Положить  $v = v+1$  и перейти к шагу 2. Поскольку  $T_{i_1}^{(v+1)} \subset T_i^{(v)}$ ,  $T_{i_2}^{(v+1)} \subset T_i^{(v)}$ ,  $\chi_i^{U(v)}(d) \geq \chi_{i_1}^{U(v+1)}(d)$ ,  $\chi_i^{U(v)}(d) \geq \chi_{i_2}^{U(v+1)}(d)$ .

Следовательно,  $C_E^{(v)} \geq C_E^{(v+1)}$ .

Приведенный алгоритм позволяет получить локальный минимум задачи (4.48) – (4.50).

Особенность этого алгоритма состоит в том, что на каждой итерации выполняется операция, которая приближает ограничение (E) к ограничению (4.48) (шаг 5, 6). Идея этой операции близка к идее метода "ветвей и границ" [63], поскольку на каждой итерации разбиению подвергаются те подобласти  $T_i^{(v)}$ , для которых верна оценка величины  $\chi(d)$  наибольшая. Фактически поиск можно прекратить при выполнении условия

$$|C_E^{(v)} - C_E^{(v+1)}| \leq \varepsilon,$$

где  $\varepsilon$  – достаточно малое число.

**Задача 7.** Формулировка этой задачи та же, что и задачи 3 за исключением того, что условие гибкости (работоспособности) проекта записывается в виде

$$\chi(d) = \min_{\theta^1 \in T^1} \min_{z \in Z} \max_{\theta^2 \in T^2} \max_{j \in J} g_j(d, z, \theta) \leq 0. \quad (4.58)$$

Рассмотрим вопрос, связанный с представлением критерия оптимизации. Для фиксированного момента времени на этапе эксплуатации ХТП значение  $\theta^1$  известно, а  $\theta^2$  может принимать любое значение из области  $T^2$ . Поэтому для фиксированного момента времени будем иметь следующую постановку оптимизационной задачи

$$\hat{C}(d, \theta^1) = \min_{z \in Z} M_{\theta^2} \left\{ C(d, z, \theta^1, \theta^2) \mid \max_{\theta^2 \in T^2} g_j(d, z, \theta^1, \theta^2) \leq 0, j \in J \right\}.$$

В качестве критерия оптимального проектирования должно быть взято математическое ожидание по  $\theta^1$  от величины  $\hat{C}(d, \theta^1)$ .

В результате приходим к следующей задаче

$$C^* = \min_d M_{\theta^1} \{ \hat{C}(d, \theta^1) \}, \quad (4.59)$$

при ограничении (4.58).

Используя метод дискретизации критерия, получим дискретный аналог задачи (4.59), (4.58).

$$C^* = \min_{d, z^i} \sum_{i \in I_1} w_{ii} C(d, z^i, \theta^{1i}, \theta^{2i}),$$

при условиях (4.58) и

$$\max_{\theta^{2i} \in T^2} g_j(d, z^i, \theta^{1i}, \theta^{2i}) \leq 0, \quad j = \overline{1, m}, \quad i \in I_1,$$

где  $w_{ii} = w_i v_i$ ,  $w_i, v_i$  – весовые коэффициенты ( $\sum v_i = 1, \sum w_i = 1$ );  $I_1, I_2$  – множества индексов аппроксимационных точек.

Сформулированная задача (4.59), (4.58) представляет определенный интерес для практики и может быть решена при помощи модифицированного алгоритма 4.

#### 4.4 Оптимизация динамических режимов нелинейных технологических объектов

Сформулируем задачу оптимальной стабилизации для класса разомкнутых систем управления: требуется найти управление  $u^*(t) \in U$ , доставляющее минимум функционалу качества вида

$$I(u^*(t), \theta^1, \bar{\theta}^2) = \min_{u \in U} \left[ \frac{1}{2} \langle (y(t_k) - y_{\text{зад}}(t_k)), F \langle (y(t_k) - y_{\text{зад}}(t_k)) \rangle + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_k} \langle (y(t) - y_{\text{зад}}(t)), Q(t) \langle (y(t) - y_{\text{зад}}(t)) \rangle + \langle u(t), G(t) u(t) \rangle dt \right],$$

(4.60)

при связях в форме уравнений математической модели динамики нелинейного химического процесса

$$\dot{y}(t) = f(y(t), u(t), \xi^1, \bar{\xi}^2); \\ y(t_0) = y_0;$$

(4.61

)

и ограничениях на качественные показатели переходного процесса в системе автоматического управления.

Здесь  $y(t), y_{\text{зад}}(t)$  –  $n$ -мерные векторы текущего и заданного состояния (программы изменения) процесса, соответственно;  $u(t)$  –  $m$ -мерный вектор управления;  $f(\bullet)$  – нелинейная по  $y$  и  $u$  вектор-функция;  $F, Q(t)$  – положительно полуопределенные матрицы ( $n \times n$ );

$G(t)$  – симметричная положительно определенная матрица ( $m \times m$ );  $\langle \bullet \rangle$  – скалярное произведение векторов.

Для решения задачи (4.60), (4.61) нами применялся метод "последовательной итерации", суть которого состоит в замене исходной нелинейной задачи сходящейся последовательностью линейных. Каждая линейная задача последовательности получается путем линеаризации нелинейной вектор-функции  $f(\bullet)$  в окрестности траектории состояния ХТП и управления, полученных при решении предыдущей линейной задачи. В первом приближении функция  $f(\bullet)$  линеаризуется в окрестности траектории  $x(t) = x_{\text{зад}}(t)$ ,  $u(t) = u^{(0)}$  для задачи оптимальной стабилизации. В этом случае система линеаризованных уравнений имеет вид:

$$\begin{aligned} \dot{x}^{(v+1)}(t) &= A^{(v)}x^{(v+1)}(t) + B^{(v)}(t)u^{(v+1)}(t) + h^{(v)}(t); \\ x^{(v+1)}(t_0) &= y_0, \end{aligned} \quad (4.62)$$

где

$$A^{(v)}(t) = \left. \frac{\partial f(x, u, \theta^1, \bar{\theta}^2)}{\partial x} \right|_{\substack{x=x^{(v)}(t); \\ u=u^{(v)}(t)}}; \quad B^{(v)}(t) = \left. \frac{\partial f(x, u, \xi^1, \bar{\xi}^2)}{\partial u} \right|_{\substack{x=x^{(v)}(t); \\ u=u^{(v)}(t)}};$$

$$h^{(v)}(t) = f(x^{(v)}, u^{(v)}, \theta^1, \bar{\theta}^2) - A^{(v)}(t)x^{(v)}(t) - B^{(v)}(t)u^{(v)}(t).$$

Задача (4.62) линейна по переменным  $x_{(t)}^{(v+1)}$ ,  $u_{(t)}^{(v+1)}$  и ее решение определяется известным соотношением для оптимального управления [68]. Последовательность линейных задач решается до тех пор, пока при некотором  $v = q$  выполняется неравенство  $\|x^{(q)} - x^{(q-1)}\| \leq \varepsilon$ .

При этом вектор управления  $u^{(q)}$  принимается в качестве решения задачи (4.60), (4.61), т.е.  $u^* = u^{(q)}$ . Заметим, что сходимость итераций в сильной степени зависит от удачного выбора начального приближения  $u^{(0)}$ .

Решение задачи синтеза оптимального управления в замкнутой системе может быть получено на базе метода АКОР по критерию обобщенной работы А.А. Красовского. В соответствии с этим методом для процесса, описываемого уравнениями

$$\dot{x}_i + f_i(x, \theta^1, \bar{\theta}^2) = \sum_{j=1}^r \varphi_{ij}(x, t)u_j, \quad (i = \overline{1, n}),$$

оптимальными в смысле минимума функционала

$$I = V_3 x(t_k) + \int_{t_0}^{t_k} Q(x, t) dt + \frac{1}{2} \int_{t_0}^{t_k} \sum_{j=1}^m \frac{u_j^2 + u_{jon}^2}{k_j^2} dt$$

являются управления

$$u_j = u_{jon} = -k_j^2 \sum_{k=1}^n \varphi_{kj}(x, t) \frac{\partial V}{\partial x_k},$$

где  $V = V(x, t)$  – решение уравнения

$$\frac{\partial V}{\partial t} - \sum_{i=1}^n f_i \frac{\partial V}{\partial x_i} = -Q,$$

при граничном условии  $V_{t=t_k} = V_3$ ,  $f_j$ ,  $\varphi_{ij}$ ,  $Q$ ,  $V_3$  – заданные непрерывные функции,  $k_j^2 > 0$  – заданные коэффициенты.

## На решении уравнений свободного движения

$$\dot{x}_M + f(x_M, \theta^1, \bar{\theta}^2, t) = 0 \quad (4.63)$$

левая часть дифференциального уравнения обращается в полную производную по времени:  $\dot{V} = -Q$ .

$$\text{Отсюда следует: } V(x_M(t_k)) - V(x_M(t_0)) = - \int_{t_0}^{t_k} Q(x_M(t)) dt.$$

По условию для терминальной задачи  $V(x_M(t_k)) = V_3(x_M(t_k))$ . Таким образом,  $V(x_M(t_k)) = V_3(x_M(t_k)) + \int_t^{t_k} Q(x_M, t) dt$ .

Допустим, что текущее время и интервал оптимизации разбиты на достаточно короткие циклы длиной  $\Delta t_{\text{ц}}$ . Начало очередного цикла с точностью до  $\Delta t_{\text{ц}}$  совпадает с текущим моментом  $t$ . Предположим, что в начале каждого цикла система контроля и оценивания реального управляемого процесса определяет вектор состояния  $x(t)$  и задает его в качестве начального значения в модель (4.63) свободного движения, обеспечивая в начале каждого цикла равенство  $x_M(t) = x(t)$ . Таким образом, интегрируя уравнения (4.63) свободного движения на интервале от  $t$  до  $t_k$ , можно вычислить

$$V(x(t)) = V_3(x_M(t_k)) + \int_t^{t_k} Q(x_M, t) dt. \quad (4.64)$$

Однако, оптимальные управления рассчитываются по формулам:

$$u_{jon} = -k_j^2 \sum_{k=1}^n \varphi_{kj} \frac{\partial V}{\partial x_k}, \quad j = \overline{1, r}, \quad (4.65)$$

и конечной целью является вычисление частных производных  $\frac{\partial V}{\partial x}$ . Точнее, как видно из (2.53), требуется определить  $r$  скалярных произведений вектора градиента  $\left( \frac{\partial V}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial V}{\partial x_n} \right)$  на векторы  $\varphi_{1j}, \dots, \varphi_{nj}$ . Обычно число управлений  $r$  меньше размерности пространства состояний  $n$ , и выгодно сразу определять проекции вектора градиента на  $(\varphi_{1j}, \dots, \varphi_{nj})$ , а не на координатные оси (т.е.  $\frac{\partial V}{\partial x_k}$ ).

Применим для вычисления компонент и проекций градиента схему правой разности. В результате получим выражение для расчета оптимальных управлений в виде

$$u_{jon} = - \frac{k_j^2}{\varepsilon \|\varphi_j\|} \left\{ \left[ V_3(x_M(t_k)) + \int_t^{t_k} Q dt \right]_{x_M(t)=x+\varepsilon\varphi_j} - \left[ V_3(x_M(t_k)) + \int_t^{t_k} Q dt \right]_{x_M=x(t)} \right\} \quad (4.66)$$

где  $\varphi_j$  – вектор (столбец) с компонентами  $\varphi_{1j}, \dots, \varphi_{nj}$ ;  $\|\varphi\|$  – норма этого вектора;  $\varepsilon$  – малая действительная величина.

Заданная функция  $V_3$  и квадратура в квадратных скобках вычисляются на траекториях свободного движения объекта (4.63), возбуждаемого начальными условиями, которые для первой скобки соответствуют вектору  $x(t) + \varepsilon\varphi_j$ , для второй скобки –  $x(t)$ . Для определения значений всех  $r$  управлений согласно (4.66) находим  $r+1$  "запуск" прогнозирующей модели (4.63). Модель свободного движения объекта можно заставить работать в ускоренном времени, вводя масштаб по времени  $\tau = t/\chi$ , где  $\chi = \text{const} \gg 1$ . Тогда уравнения прогнозирующей модели имеют вид

$$\frac{dx_M}{d\tau} + \chi f(x_M, \theta^1, \bar{\theta}^2, \chi\tau) = 0.$$



Темп интегрирования, характеризуемый величиной  $\chi$ , должен быть таков, чтобы за каждый цикл  $\Delta t_{\text{ц}}$  осуществлялось достаточное число "прогонок" свободного движения на интервале  $t_k - t$ , необходимое для численного определения частных производных  $\frac{\partial V}{\partial x_i}$ . В этом случае

$$V(x(\tau)) = V_3(x_M(\tau_k)) + \chi \int_{\tau=t/\chi}^{\tau_2=t_2/\chi} Q(x_M, \chi\tau) dt.$$

Сформулированные согласно (4.66) управления подаются на объект

$$\dot{x} + f(x, t) = \varphi u$$

и остаются неизменными в течение определенного цикла  $\Delta t_{\text{ц}}$ .

Описанный алгоритм с прогнозирующей моделью с точностью до ошибок, связанных с дискретизацией во времени, ошибок интегрирования уравнений свободного движения (ошибок модели), ошибок датчиков и ошибок численного дифференцирования для определения проекций градиента является точным алгоритмом. Это означает, что если указанные ошибки стремятся к нулю, то формируемые управления стремятся к строго оптимальным в смысле минимума критерия обобщенной работы. Однако при практическом осуществлении каждая из перечисленных ошибок играет определенную роль. В частности, при больших интервалах оптимизации существенное вредное влияние могут оказывать ошибки численного интегрирования уравнения свободного движения. При этом уровень этих ошибок может сильно зависеть от того, что принимается за свободное движение и каково, стало быть, уравнение прогнозирующей модели.

В описанном варианте алгоритма за свободное движение объекта принималось движение при  $u = 0$ , т.е. движение при нейтральных, нулевых положениях органов управления. Лучшие результаты в смысле точности моделирования свободного движения можно ожидать в том случае, когда под свободным движением понимается движение при фиксированных положениях органов управления, причем эти положения соответствуют управлениям, вычисленным на предшествующих циклах оптимизации.

Рассмотрим соответствующий вариант алгоритма оптимального управления с прогнозирующей моделью. Уравнения управляемого процесса записываются в виде

$$\begin{aligned} \dot{x}_i + f_i(x_1, \dots, x_n, y_1, \dots, y_r, \theta^1, \bar{\theta}^2) &= 0, \quad i = \overline{1, n}, \\ \dot{y}_j &= u_j, \quad j = \overline{1, r}, \end{aligned}$$

где  $y = (y_1, \dots, y_r)$  – вектор органов управления;  $u = (u_1, \dots, u_r)$  – вектор управления. Таким образом, в данном случае осуществляется управление скоростями перемещения органов управления.

Отмечая, что свободное движение воспроизводится прогнозирующей моделью в ускоренном времени, записываем

$$\begin{aligned} \frac{dx_M}{d\tau} + \chi f(x_M, y_M, \theta^1, \bar{\theta}^2) &= 0, \\ \frac{dy_M}{d\tau} &= 0. \end{aligned}$$

В начале каждого цикла  $\Delta t_{\text{ц}}$  переменные состояния процесса вводятся в прогнозирующую модель. В данной задаче имеем расширенный вектор состояния  $(x, y)$ . Для численного определения частных производных  $\frac{\partial V}{\partial y_j}$  осуществляем варьирование начальных условий по  $y_M$  в каждом запуске прогнозирующей модели.

Для преобразования данного алгоритма в алгоритм нетерминального управления необходимо осуществить переход к скользящему интервалу оптимизации, при котором  $t_k = t + \Delta T$ , где  $\Delta T$  – заданная

длина интервала оптимизации. При этом определение  $t_k$  осуществляется из условия достижения, например, выхода целевых продуктов заданного (максимального) значения.

Наиболее трудоемкой операцией в алгоритме с прогнозирующей моделью является численное интегрирование уравнений свободного движения, выполняемое в каждом цикле  $r+1$  раз. Предположим, что для численного интегрирования с достаточной точностью уравнений свободного движения (4.63) на начальном интервале оптимизации  $t_k - t$  необходимо  $M$  операций. Интервал интегрирования с каждым тактом сокращается (при фиксированном моменте времени  $t_k$ ) и среднее число операций однократного интегрирования (при достаточно большом числе циклов) будет равным  $0,5M$ . Обозначим общее число циклов, на которые разбит интервал оптимизации ( $t_k - t$ ) через  $n_{\text{ц}}$ . Тогда общее число операций, необходимых для решения задачи синтеза оптимального управления выражается формулой  $\sim \frac{1}{2}n_{\text{ц}}(r+1)M$ .

#### **4.5 Применение метода имитационного моделирования для интегрированного проектирования технологических процессов, аппаратов и систем управления при наличии неопределенности исходной информации**

Имитационное моделирование на ЭВМ реальных объектов представляет собой метод получения необходимой информации в ходе проведения вычислительного эксперимента [8]. Основная цель имитационного моделирования заключается в возможно более глубоком изучении поведения исследуемого объекта с использованием стохастической модели при наименьших затратах. При построении стохастических имитационных моделей необходимо обеспечить возможность генерирования случайных чисел и процессов в соответствии с заданными законами распределения вероятностей случайных факторов для исследуемого процесса. Подлежащее ранжированию распределение вероятностей может быть основано на результатах эксперимента, либо представлять собой известное теоретическое распределение (нормальное, равномерное и др.).

При моделировании сложных химических процессов и аппаратов в условиях неопределенности исходной информации получить необходимый объем данных для идентификации закона распределения вероятностей неопределенных параметров крайне сложно, поскольку требует проведения большого количества экспериментов. В этом случае вывод о принятии гипотезы относительно законов распределения неопределенных параметров можно сделать только на основе экспертных оценок.

Имитационная модель химического процесса представляет собой аналитическую математическую модель со случайными параметрами  $\theta$ , генерируемыми на ЭВМ в соответствии с заданными законами распределения вероятностей этих случайных параметров. Чаще всего принимается равномерный закон распределения параметров  $\theta$ , для которых известен интервал их возможного изменения  $\theta^L \leq \theta \leq \theta^U$ .

Рассмотрим реализацию алгоритма 2 в п. 4.3. с использованием метода имитационного моделирования. В этом алгоритме применяются две модели проектируемого ХТП: детерминированная модель –  $\mathfrak{Z}(d, z, \bar{\theta})$  и стохастическая модель –  $\mathfrak{Z}_c(d, z, \theta)$ . Детерминированная модель используется для решения задачи НЛП при определении оптимальных значений векторов проектных параметров  $d^*$  и режимных (управляющих) переменных  $z^*$ , а стохастическая модель  $\mathfrak{Z}_c(d, z, \theta)$  служит для вычисления вероятностных интегралов от функций ограничений методом Монте-Карло [66]. На рис. 4.5 представлена блок-схема реализации алгоритма 2 (п. 4.3) с использованием метода имитационного моделирования. Решение одно- и двухэтапных задач оптимального проектирования ХТП, аппаратов и систем управления на заключительном этапе проектирования осуществляется методом имитационного моделирования.

Известно [69 – 72], что задача многокритериального проектирования может быть либо сведена к однокритериальной методом упорядочения векторных критериев при помощи обобщенной функции цели [119], либо решена методом исследования пространства параметров, в котором осуществляется "зон-

дирование" множества искомых параметров оптимизации точками последовательности, равномерно распределенной в параллелепипеде [70, 71].

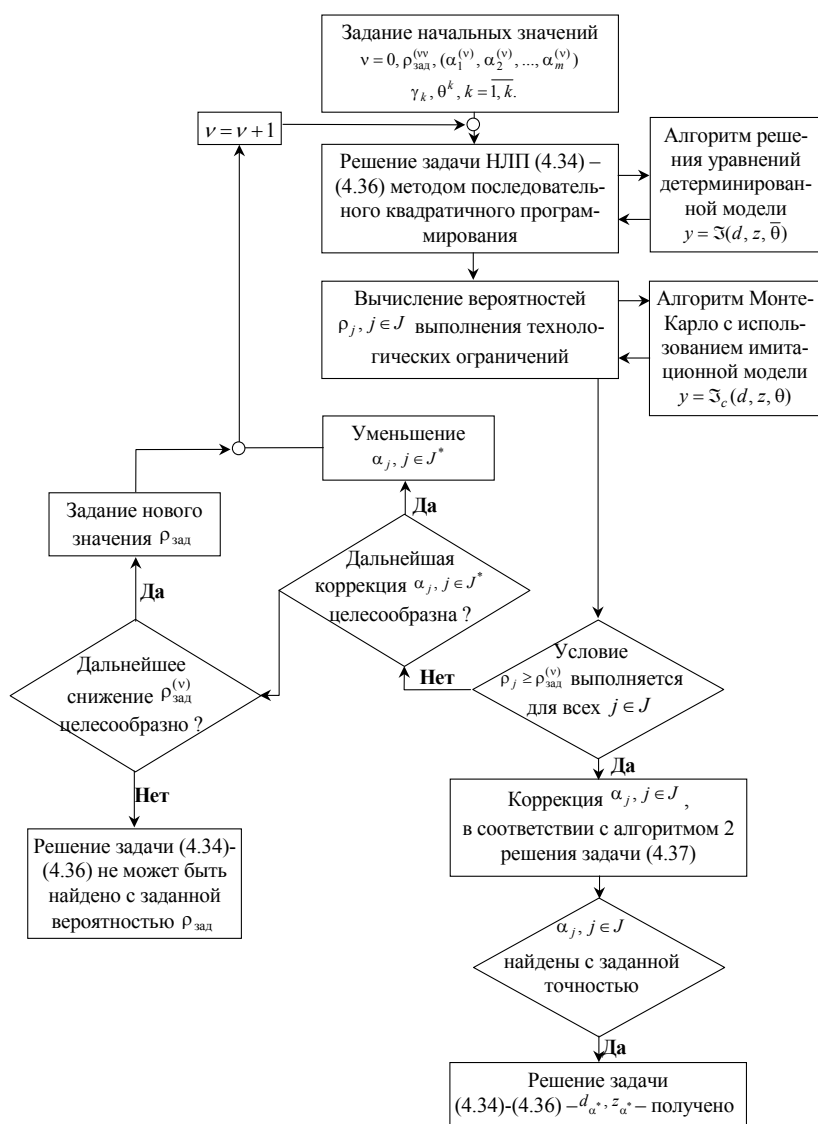
Задачи статической и динамической оптимизации проектируемого комплекса "ХТП – система управления" решаются последовательно итерационным методом (рис. 4.6).

Рассмотрим особенности применения метода имитационного моделирования для оценки эффективности функционирования автоматизированного комплекса "ХТП – система управления" в статике и динамике.

Эффективность функционирования комплекса "ХТП – автоматизированная система статической оптимизации (ССО)" оценивается векторной целевой функцией с компонентами

$$\bar{I}_i^{CCO}(d) = M_0 \{C_i(d, z^*, \theta)\}, \quad i = \overline{1, L}, \quad (4.67)$$

где  $C_i(d, z^*, \theta)$  – оптимальные значения технологических и технико-экономических показателей комплекса (выход целевого продукта, степень чистоты химического продукта, показатели энерго- и ресурсосбережения, экологической чистоты и т.п.);  $\theta$  – вектор неопределенных параметров.

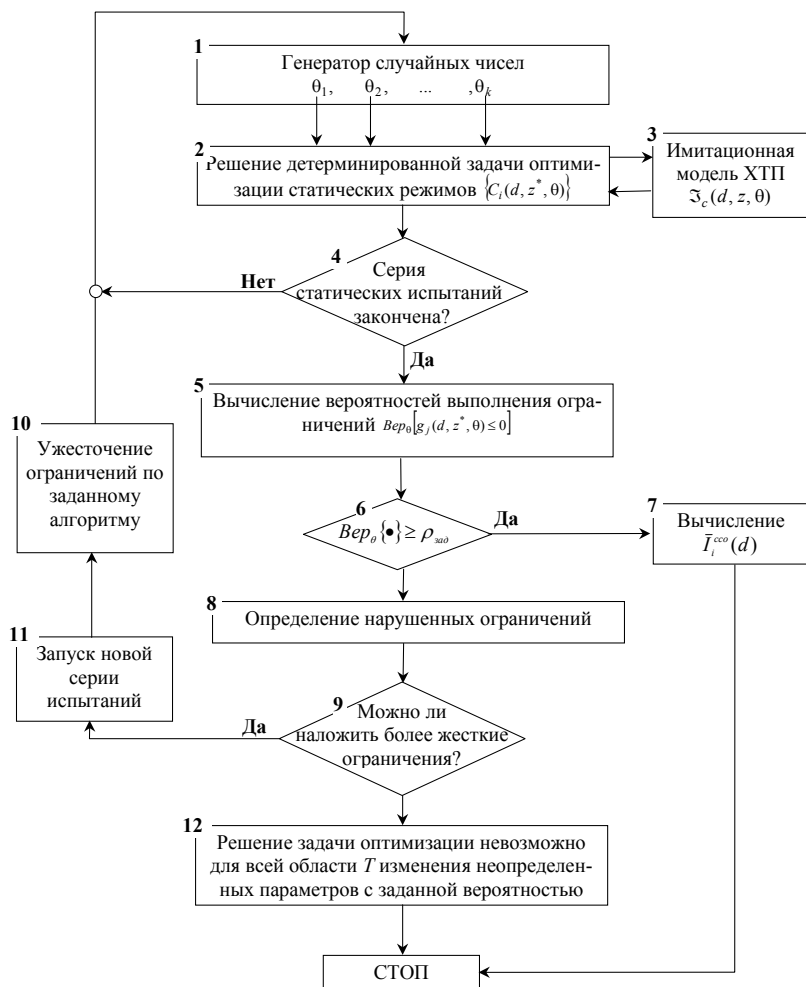


**Рис. 4.5** Блок-схема имитационного алгоритма решения задачи (4.34) – (4.36)



**Рис. 4.6 Итерационная процедура многокритериальной оптимизации комплекса "ХТП – аппарат – система управления"**

Вычисление  $\bar{I}_i^{CCO}$  и вероятностей выполнения технологических условий  $Ver_0[g_j(d, z, \theta) \leq 0] \geq \rho_{зад}$  будем осуществлять методом Монте-Карло по схеме, изображенной на рис. 4.7.



**Рис. 4.7** Блок-схема алгоритма оценки эффективности автоматизированной системы статической оптимизации

В блоке 1 работают датчики случайных чисел, имитирующие возможные законы изменения составляющих вектора неопределенных параметров  $\theta$ . Вырабатываемые этими датчиками случайные числа  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k$  поступают в блок 2, где решаются детерминированные задачи оптимизации статических режимов ХТП (внутренние задачи оптимизации в алгоритме 2 из п. 4.3).

В блоках 5, 6 рассчитываются вероятности выполнения технологических условий и проверяется выполнение вероятностных ограничений. Если технологические условия не выполняются с заданной вероятностью  $\rho_{зад}$ , то в блоке 8 выявляются нарушенные ограничения, а в блоках 9, 10, 11 производится их ужесточение и запуск новой серии испытаний. В противном случае в блоке 7 вычисляются оценки математического ожидания  $\bar{I}_i^{CCO}$  компонент вектора  $C_i(d, z, \theta)$ , представляющих технологические и технико-экономические показатели эффективности функционирования ХТП и систем статической стабилизации.

Наибольшую погрешность в работе ССО будет вызывать идентификация компонент вектора  $\theta^1$  неопределенных параметров на стадии эксплуатации ХТП, которые не поддаются непосредственному измерению, а идентифицируются с помощью математической модели по результатам измерения косвенных переменных. Таким образом значения компонент вектора  $\hat{C}(d, z^*, \theta_k \pm \Delta\theta_k, k=1, K)$  реальной ССО вследствие ошибок  $\Delta\theta_k$  будет отличаться от оптимальных значений вектора  $C(d, z^*, \theta_k, k=\overline{1, K})$ . Разложим  $\hat{C}(\bullet)$  в ряд Тейлора в окрестности истинных значений неопределенных параметров  $\theta_k$ , получим

$$\tilde{C}(d, \tilde{z}^*, \theta_k \pm |\Delta\theta_k|) = C(d, z^*, \theta_k) + \Delta C_{\theta_1} + \Delta C_{\theta_2} + \dots + \Delta C_{\theta_k};$$

где

$$\Delta C_{\theta_k} = \begin{cases} \left( \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \theta_k} \right)^+ \Delta \theta_k; & \text{при } \Delta \theta_k > 0, \\ \left( \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \theta_k} \right)^- \Delta \theta_k; & \text{при } \Delta \theta_k < 0, \end{cases}$$

$$\left( \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \theta_k} \right)^\pm \approx \frac{\tilde{C}(d, \tilde{z}^*, \theta_k \pm |\Delta \theta_k|) - C(d, z^*, \theta_k)}{|\Delta \theta_k|}.$$

В этом случае коррекция найденных значений  $\tilde{C}(d, \tilde{z}^*, \theta)$  может быть выполнена по формулам

$$\hat{C}(\bullet) = \tilde{C}(d, \tilde{z}^*, \theta) - \left( \sum_{k=1}^K \Delta C_k \right), \quad (4.68)$$

где

$$\Delta C_{\theta_k} = \left( \frac{\partial \hat{C}}{\partial \theta_k} \right)^- \int_{-\infty}^0 \Delta \theta_k P(\Delta \theta_k) d\Delta \theta_k + \left( \frac{\partial \hat{C}}{\partial \theta_k} \right)^+ \int_0^{\infty} \Delta \theta_k P(\Delta \theta_k) d\Delta \theta_k. \quad (4.69)$$

Если ошибка в определении  $\theta_k$  подчиняется нормальному закону распределения, то интегралы в последнем выражении можно переписать в виде:

$$\int_{-\infty}^0 \Delta \theta_k \frac{1}{2\pi\sqrt{D\{\Delta \theta_k\}}} \exp\left(-\frac{(\Delta \theta_k - M\{\Delta \theta_k\})^2}{D\{\Delta \theta_k\}}\right) d\Delta \theta_k;$$

$$\int_0^{\infty} \Delta \theta_k \frac{1}{2\pi\sqrt{D\{\Delta \theta_k\}}} \exp\left(-\frac{(\Delta \theta_k - M\{\Delta \theta_k\})^2}{D\{\Delta \theta_k\}}\right) d\Delta \theta_k.$$

Блок-схема вычисления  $\bar{I}_i^{\text{CCO}}$  с использованием (4.67) – (4.68) представлена на рис. 4.8.

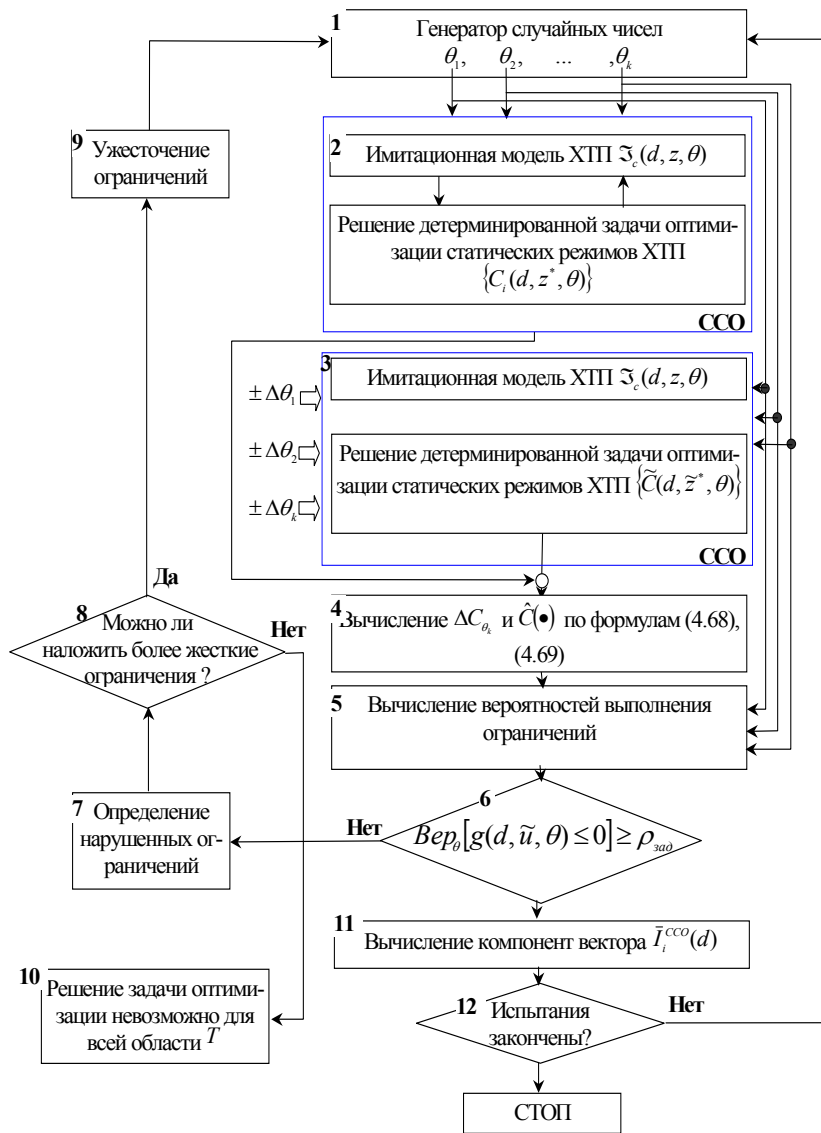
В блоке 1 генерируются случайные величины  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k$  с использованием соответствующих плотностей распределения. В блоке 2 для каждой реализации  $\theta^{(v)}$  рассчитывается оптимальный режим функционирования ХТП –  $z^*$  и оптимальные значения векторной целевой функции.

В блоке 3 последовательно вычисляются квазиоптимальные режимы  $\tilde{z}^*$  для неопределенных параметров  $\theta_k \pm \Delta \theta_k$ . При этом блок 3 работает последовательно  $2K$  раз, каждый раз для отдельной независимой группы неопределенных параметров (здесь  $K$  – размерность вектора  $\theta$ ).

В блоке 4 вычисляются значения компонент вектора  $\tilde{C}(d, \tilde{z}^*, \theta)$  и  $\Delta C_{\theta_k}$  по формулам (4.68), (4.69).

Блоки 5 – 9 предназначены для вычисления вероятностей и проверки выполнения технологических условий с заданной вероятностью

$$\bar{I}_i^{\text{CCO}(v)}(d) = \left[ \bar{I}_i^{\text{CCO}(v-1)}(d)(v-1) + \hat{C}_i^{(v)} \right] / v,$$



**Рис. 4.8** Блок-схема алгоритма расчета показателей эффективности ССО

где  $v$  – номер испытания в серии; при  $v=0$  –  $\bar{I}_i^{\text{CCO}(0)}(d) = 0$ ; при  $v=1$  –  $\bar{I}_i^{\text{CCO}(1)}(d) = \hat{C}_i^{(1)}$ ;  $i = \overline{1, L}$  – номер компоненты векторной целевой функции  $\bar{I}_i^{\text{CCO}}(d)$ .

Эффективность функционирования комплекса "ХТП – АСР" будем оценивать обобщенной целевой функцией

$$\bar{I}^{\text{АСР}}(d, h, y_{\text{зад}}) = M_{\theta} \left\{ \sum_{i=1}^L \Delta C_i(d, h, y_{\text{зад}}, \theta) \right\}, \quad (4.70)$$

где  $L$  – количество показателей эффективности функционирования комплекса;  $h$  – структура АСР,  $y_{\text{зад}}$  – вектор заданий регуляторам АСР;  $\Delta C_i$  – разности между оптимальными значениями функций  $C_i^*(d, z^*, \theta) \approx \tilde{C}_i^*(\bullet)$  и их значениями в режимах, поддерживаемых в классе систем автоматической стабилизации.

$$\bar{C}_i(d, h, y_{\text{зад}}, \theta) = C_i(d, h, y_{\text{зад}}, \theta) \pm \sum_{j=1}^q R_{ij}(\theta), \quad (4.71)$$

где  $C_i(d, h, y_{\text{зад}}, \theta)$  – значения целевой функции при режимах, поддерживаемых АСР со структурой  $h$  и заданиями регуляторам  $y_{\text{зад}}$ ;  $R_{ij}$  – штраф за нарушение  $j$ -го ограничения в режиме, определяемом  $\theta$ .

В блоке 11 итерационно проводится вычисление компонент вектора целевой функции, представляющей показатели эффективности функционирования комплекса "ХТП – автоматизированная ССО" в статических режимах:

Вычисление критерия эффективности (4.70) проводится в соответствии с алгоритмом, представленным в виде блок-схемы (рис. 4.9).

В блоке 1 работают датчики случайных чисел в соответствии с заданными законами распределения  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k$ . Выработанные этими датчиками случайные числа  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k$  поступают в блок 2, где рассчитывается статический режим, поддерживаемый АСР с заданной структурой  $h$ . В блоке 4 осуществляется решение детерминированной задачи оптимизации статических режимов ХТП и определяются  $C_i(d, z^*, \theta)$ , необходимые для расчета  $\Delta C_i(d, h, y_{\text{зад}}, \theta)$ .

В блоке 6 рассчитываются  $\bar{C}_i(\bullet)$  по формуле (2.66) и  $\Delta C_i$ , а в блоке 7 итерационно определяется

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- 1 Самарский А.А., Михайлов А.П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. М.: Физматлит, 2001. 320 с.
- 2 Кафаров В.В., Дорохов И.Н. Системный анализ процессов химической технологии. М.: Наука, 1976. 500 с.
- 3 Цирлин А.М., Миронова В.А., Крылов Ю.М. Сегрегированные процессы в химической промышленности. М.: Химия, 1986. 232 с.
- 4 Фролов В.Ф. Моделирование сушки дисперсных материалов. Л.: Химия 1987. 208 с.
- 5 Дудников Е.Г., Балакирев В.С. и др. Построение математических моделей химико-технологических объектов. М.: Химия, 1970. 312 с.
- 6 Дрейпер Н., Смит Г. Прикладной регрессионный анализ. М.: Финансы и статистика, 1986. 366 с.
- 7 Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. Учеб. пособие для вузов. М.: Высш. шк., 1978. 319 с.
- 8 Шеннон Р. Имитационное моделирование систем – искусство или наука. М.: Мир, 1978. 318 с.
- 9 Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. Учеб. пособие для вузов. М.: Наука, 1989. 432 с.
- 10 Бахвалов Н.С. Численные методы. Учеб. пособие для вузов. М.: Наука, 1975. 632 с.
- 11 Джонс Дж. К. Методы проектирования / Пер. с англ. М.: Мир, 1986. 326 с.
- 12 Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1972. 736 с.
- 13 Кафаров В.В., Глебов М.Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств: Учеб. пособие для вузов. М.: Высш. шк., 1991. 400 с.
- 14 Гинзбург А.С., Савина И.М. Массовлагообменные характеристики пищевых продуктов. М.: Легкая и пищевая пром-сть. 1982. 280 с.
- 15 Гинзбург А.С. Технология сушки пищевых продуктов. М.: Пищевая пром-сть. 1976. 248 с.
- 16 Дворецкий С.И., Пестрецов С.И., Дмитриев В.М. Аппаратурное оформление процесса конвективной сушки дисперсных материалов с высоким диффузионным сопротивлением // Труды 1-го Международ. науч.-практ. семинара "Современные энергосберегающие технологии (сушка и термовлажностная обработка материалов)". М.: МГАУ им. В.П. Горячкина, 2002. Т. 3. С. 83 – 87.
- 17 Рудобашта С.П. Массоперенос в системах с твердой фазой. М.: Химия. 1979. 282 с.
- 18 Мальтри В. Сушильные установки сельскохозяйственного назначения. М.: Машиностроение. 1979. 526 с.
- 19 Павлов К.Ф., Романков П.Г., Носков А.А. Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии. Л.: Химия, 1987. 576 с.
- 20 Дворецкий С.И., Кормильцин Г.С., Пестрецов С.И. Исследование гидродинамики движущегося плотного поперечно-продуваемого кольцевого слоя зерновых культур // Вестник ТГТУ, 2002. Т. 7, № 2. С. 215 – 224.



- 21 Дворецкий С.И., Майстренко А.В., Дворецкий Д.С., Утробин Н.П. Разработка непрерывной энерго- и ресурсосберегающей технологии получения азокрасителей // Вестник ТГТУ. 1997. Т. 2, № 1. С. 76 – 82.
- 22 Разработка непрерывного технологического процесса получения пигмента алого / Кудрявцев А.М., Дворецкий С.И., Баранов Б.А., Брюске Э.Я. Стаханова В.В. // ЖПХ, 1988. № 11. С. 2525 – 2531.
- 23 Макрокинетика процесса растворения 3-нитро-4-аминотолуола / Баранов Б.А., Бодров В.И., Дворецкий С.И., Калинин В.Ф., Кудрявцев А.М. // Кинетика и катализ. 1984. Т. 25, № 6. С. 1457 – 1461.
- 24 Бодров В.И., Дворецкий С.И., Кудрявцев А.М. Математическое моделирование процесса получения азокрасителей // Изв. вузов. Химия и хим. технология, 1985. Т. 28, № 1. С. 81 – 86.
- 25 Гордеев Л.С., Дворецкий С.И., Кудрявцев А.М. Математическое моделирование и исследование непрерывной технологии синтеза азокрасителей // Хим. пром-сть, 1990. № 10. С. 44 – 48.
- 26 Турбулентное смешение в малотонажных трубчатых аппаратах химической технологии / Тахавутдинов Р.Г., Дьяконов Г.С., Дебердеев Р.Я., Минскер К.С. // Хим. пром-сть, 2000. № 5. С. 41 – 49.
- 27 Трубчатые турбулентные реакторы – основа энерго- и ресурсосберегающих технологий / Берлин А.А., Дюмаев К.М. Минскер К.С. и др. // Хим. пром-сть, 1995. № 9. С. 550 – 559.
- 28 Увеличение коэффициента турбулентной диффузии в зоне реакции как способ улучшения технико-экономических показателей в производстве полимеров / Минскер К.С., Захаров В.П., Тахавутдинов Р.Г. и др. // ЖПХ, 2001. Т. 74. Вып. 1. С. 87 – 91.
- 29 Берлин А.А., Минскер К.С., Дюмаев К.М. Новые унифицированные энерго- и ресурсосберегающие высокопроизводительные технологии повышенной экологической чистоты на основе турбулентных реакторов // М.: НИИТЭХИМ, 1996. 188 с.
- 30 Дворецкий С.И., Карнишев В.В., Дворецкий Д.С. Разработка энерго- и ресурсосберегающих технологических установок непрерывного действия // Химическое и нефтегазовое оборудование, 1998. № 4. С. 4 – 7.
- 31 Разработка прогрессивных технологий и оборудования перенастраиваемых автоматизированных анилинокрасочных производств / Бодров В.И., Дворецкий С.И. и др. // Хим. пром-сть, 1997. № 1. С. 64 – 73.
- 32 Дворецкий С.И., Майстренко А.В. Новые подходы к созданию ресурсо- и энергосберегающих производств // Тез. докл. V Междунар. конф. "Научно-технические химические технологии". Ярославль, 1998. С. 59 – 61.
- 33 Дворецкий С.И., Калинин В.Ф., Майстренко А.В., Дворецкий Д.С. Разработка и исследование прогрессивной технологии и ресурсосберегающей техники в производстве азокрасителей // Тез. докл. VI Междунар. конф. "Научно-технические химические технологии". М., 1999. С. 47 – 49.
- 34 Фарлоу С. Уравнения с частными производными. М.: Мир, 1985. 384 с.
- 35 Холл Д., Уатт Д. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1970. 312 с.
- 36 Хайрер Э., Нерсетт С., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1987. 572 с.
- 37 Норенков И.П. Основы автоматизированного проектирования. М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2000. 360 с.
- 38 Дворецкий С.И., Кормильцин Г.С., Королькова Е.М. Основы проектирования химических производств: Учеб. пособие для студентов вузов. Тамбов: Изд-во Тамб. гос. техн. ун-та, 1999. 184 с.
- 39 Кафаров В.В., Ветехин В.Н. Основы автоматизированного проектирования химических производств. М., 1987. 623 с.
- 40 Воронов А.А. Основы теории автоматического управления. М.: Энергия, 1980. 312 с.
- 41 Halemane K.P., Grossmann I.E. Optimal process design under uncertainty // A.I.Ch.E. Journal. 1983. V. 29, No. 3. P. 425 – 433.
- 42 Biegler L.T., Grossmann I.E., Westerberg A.W. Systematic methods of chemical process design. New Jersey: Carnegie Mellon University, 1997. 796 p.
- 43 Бельков В.П., Савицкая Т.В., Егоров А.Ф. Гибкость химических производств: Учеб. пособие. М.: РХТУ им. Д.И. Менделеева, 2000. 40 с.

- 44 Grossmann I.E., Floudas C.A. Active constraint strategy for flexibility analysis in chemical engineering // *Comp&Chem. Eng.* 1987. V. 11, № 6. P. 675 – 693.
- 45 Swaney R.E., Grossmann I.E. An index for operational flexibility in chemical process design. Part 1: formulation and theory // *A.I.Ch.E. Journal.* 1985. V. 31, No. 4. P. 621 – 641.
- 46 Базара М., Шетти К. Нелинейное программирование. М.: Мир, 1982. 583 с.
- 47 Floudas C.A. Nonlinear and mixed-integer optimization. New York-Oxford: Oxford University Press, 1995. 462 p.
- 48 Реклейтис Г., Рейвиндран А., Рэгсдел К. Оптимизация в технике: В 2 кн. М.: Мир, 1986. 667 с.
- 49 Гилл Ф., Моррей У., Райт М. Практическая оптимизация. М.: Мир, 1985. 509 с.
- 50 Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. М.: Наука, 1983. 384 с.
- 51 Химельблау Д. Прикладное нелинейное программирование. Мир, 1975. 534 с.
- 52 Schittkowski K. Nonlinear programming codes: information, tests, performance, lecture notes in economics and mathematical systems, V. 183, Springer-Verlag, New York, 1980.
- 53 Красовский А.А. Теория управления движением. М., 1968. 75 с.
- 54 Понтрягин Л.С., Болтянский В.Г., Гамкрелидзе Р.В., Мищенко Е.Ф. Математическая теория оптимальных процессов. М., 1969. 92 с.
- 55 Шендрик В.С. Синтез оптимальных управлений методом прогнозирующей модели // *ДАН СССР.* 1975. Т. 224, № 3. С. 561 – 562.
- 56 Красовский А.А., Буков В.Н., Шендрик В.С. Универсальные алгоритмы оптимального управления непрерывными процессами // М., 1977. 272 с.
- 57 Красовский А.А., Шендрик В.С. Универсальный алгоритм оптимального управления непрерывными процессами // *А и Т.* 1977. Т. 38, № 2. С. 5 – 13.
- 58 Буков В.Н. Адаптивные прогнозирующие системы управления полетом. М., 1987.
- 59 Бодров В.И., Дворецкий С.И., Дворецкий Д.С. Оптимальное проектирование энерго- и ресурсосберегающих процессов и аппаратов химической технологии // *ТОХТ.* 1997. Т. 31, № 5. С. 542 – 548.
- 60 Бодров В.И., Дворецкий С.И., Стратегия синтеза гибких автоматизированных химико-технологических систем // *ТОХТ,* 1991. Т. 25, № 5. С. 716 – 730.
- 61 Островский Г.М., Волин Ю.М. и др. Оптимизация химико-технологических процессов в условиях неопределенности // *ТОХТ.* 1993. Т. 27, № 2. С. 183 – 191.
- 62 Волин Ю.М., Островский Г.М. Оптимизация технологических процессов в условиях частичной неопределенности исходной информации // *А и Т.* 1995. № 2. С. 85 – 98.
- 63 Островский Г.М., Волин Ю.М., Головашкин Д.В. Новые подходы к исследованию гибкости и оптимизации химико-технологических процессов в условиях неопределенности // *ТОХТ.* 1997. Т. 31, № 2. С. 202 – 207.
- 64 Островский Г.М., Волин Ю.М. О новых проблемах в теории гибкости и оптимизации химико-технологических процессов при наличии неопределенности // *ТОХТ.* 1999. Т. 33, № 5. С. 578 – 590.
- 65 Островский Г.М., Волин Ю.М., Сенявин М.М., Бережинский Т.А. О гибкости химико-технологических процессов // *ТОХТ.* 1994. Т. 28, № 1. С. 54 – 61.
- 66 Пападимитриу Х., Стайглиц К. Комбинаторная оптимизация. Алгоритмы и сложности. М.: Мир, 1985.
- 67 Дворецкий Д.С., Дворецкий С.И. Постановка задач и проблемы интегрированного проектирования гибких автоматизированных химико-технологических процессов при наличии неопределенности // *Вестник ТГТУ,* 2003. Т. 9. № 3. Ч. 1. С. 360 – 381.
- 68 Справочник по теории автоматического управления / Под ред. А.А. Красовского. М., 1987. 712 с.
- 69 Батищев Д.И. Методы оптимального проектирования. М.: Радио и связь, 1984. 248 с.
- 70 Соболев И.М., Статников Р.Б. Выбор оптимальных параметров в задачах со многими критериями. М.: Наука, 1981. С. 110 – 118.
- 71 Соболев И.М., Статников Р.Б. Постановка некоторых задач оптимального проектирования при наличии ЭВМ. М.: Препринт ИПМ АН СССР, 1977. № 24.
- 72 Евтушенко Ю.Г., Потапов М.А. Методы численного решения многокритериальных задач // *ДАН СССР,* 1986. Т. 291, № 1. С. 25 – 29.

73 Соболев И.М. Многомерные квадратурные формулы и функции Хаара. М.: Наука, 1969.

74 Сухарев А.Г. Об оптимальных методах решения многокритериальных задач // Изв. АН СССР Техн. кибернетика, 1982. № 3. С. 67.