

1. Химико-технологические системы как объекты моделирования

1.1. Общесистемные свойства

Система (от греч. *συστήμα*— целое, составленное из частей) — совокупность элементов, находящихся в отношениях и связях друг с другом, образующая определенную целостность, единство.

Обычно на систему S (англ. *system*) действуют экзогенные (внешние) факторы. Внешние воздействия на систему $X(t)$ называются средой E (англ. *environment*), входными переменными или стимулами (рис.1). Система реагирует на внешние воздействия, то есть оказывает воздействие на среду. Воздействия системы на среду называются выходными переменными или реакцией системы $Y(t)$. В частном случае система может не испытывать воздействия среды, тогда она называется замкнутой, в противном случае открытой. Систему характеризуют состояния $Z(t)$.

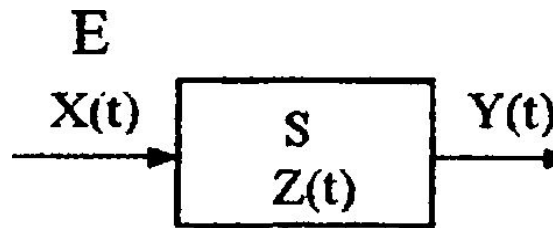


Рис.1. Представление системы

Формально открытую систему можно представить в виде

$$Z(t) = F[X(t), Z(t_0)] \quad (1)$$

$$Y(t) = G [X(t), Z(t)] \quad (2)$$

то есть для ее полного описания

необходимо задать множества: входных значений

$X(t) = \{x_1(t), x_2(t), \dots, x_m(t)\}$, множество состояний системы в начальный момент $Z(t_0) = \{z_1(t_0), z_2(t_0), \dots, z_l(t_0)\}$ и отображения: F , переводящее

множество входов в множество состояний, и G , переводящее множество входов и состояний в множество выходов

$y(t) = \{y_1(t), y_2(t), \dots, y_n(t)\}$.

Химико-технологическая система (ХТС) — это совокупность технологических и информационных процессов, технологического и информационно-управляющего оборудования, предназначенных для производства химической продукции и находящихся в определенных отношениях (связях, взаимодействиях).

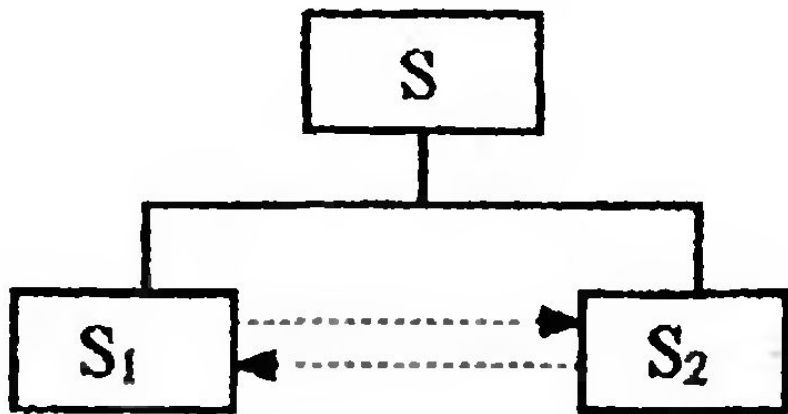


Рис.2. Обобщенная структура ХТС

Так как в сложных ХТС S происходят разнообразные процессы, заключающиеся в обмене веществом, энергией, информацией, то они состоят из двух подсистем: процессно-аппаратурной S_1 и информационно-управляющей S_2 (рис.2).

Первую S_1 образуют технологические аппараты (химические реакторы, аппараты для разделения и т.п.) с системой материальных коммуникаций. Совокупность технологических аппаратов и материалопроводов представляет аппаратурную структуру ХТС.

Вторая S2 представлена процессами обмена информацией и информативно-управляющим оборудованием (измерительными устройствами, преобразователями информации, управляющими машинами и т.п.). Между системами S1 и S2 имеют место информационные и инструктивные взаимодействия.

Элементами (или подсистемами) ХТС в зависимости от цели исследования могут быть отдельные технологические процессы, отдельные аппараты, измерительные устройства, устройства управления и т.п. Между элементами ХТС происходят *взаимодействия*: материальные, заключающиеся в транспортировании (переносе) массы или некоторых компонентов из одних частей системы в другие «например, из одних технологических аппаратов в другие), энергетические, состоящие в обмене энергией между отдельными элементами системы (наиболее часто в ХТС энергия передается в форме теплоты, хотя не исключены и другие энергетические процессы — оптическое излучение, механическая энергия, акустические колебания и др.), информационные, заключающиеся в передаче информации в системе. Кроме того, на систему воздействуют *управляющие команды* с целью заставить ее функционировать в желаемом направлении.

Любая ХТС обладает практически бесконечным числом свойств.

ХТС задается набором своих свойств и назначением каждому из них определенной переменной.

С каждым свойством связано *множество его проявлений*. Например, концентрация продукта реакции имеет конкретные числовые значения. *Конкретное проявление свойства* имеет место при единичном наблюдении этого свойства. Для определения изменений, происходящих на объекте, требуется *множество наблюдений* этого свойства, которые необходимо отделить друг от друга. С этой целью определяется так называемая база (англ. backdrop). В качестве базы чаще всего используется *время*, когда одинаковые наблюдения производятся в разные моменты времени, и *пространство*, когда одинаковые наблюдения выполняются в разных точках пространства. Иногда применяются комбинации «пространство-время».

К свойствам системы, выбираемым в качестве базы, предъявляются следующие требования.

- Базы должны быть применимы ко всем свойствам системы, для которых они определены.
- Базы должны соответствовать назначению, для которого определена система.
- Измерения всех свойств системы должны однозначно определяться базами системы,.

Переменная (англ. variable) — это операционное представление свойства. Каждая переменная имеет имя (идентификатор), которым она отличается от других переменных и может принимать множество значений.

Параметр (англ. parameter) — это операционное представление базы. Параметр, как и переменная, имеет имя.

Всякую систему, в том числе ХТС, характеризуют **структура** и способ **функционирования**. **Структура** есть инвариантная во времени фиксация связей между частями системы. **Функционирование** — это закон изменения состояния системы и ее структуры во времени.

Приведем и опишем проявление в ХТС основных общесистемных свойств, к которым относятся:

- целенаправленность,
- физичность,
- сложность,
- эмерджентность,
- целостность,
- автономность,
- моделируемость.

Целенаправленность — это функциональная тенденция, направленная на достижение системой заданного состояния.

При функционировании проявляются такие свойства *свойства системы* как **устойчивость** — способность противостоять внешним воздействиям и **управляемость**

Следствием целенаправленности является принцип выбора, так как процедура выбора выделяет из множества возможных способов функционирования систем некоторое их подмножество, приближая систему к поставленной цели.

Принцип **физичности** состоит в том, что поведение (функционирование) системы и ее подсистем обуславливается физико-химическими законами или закономерностями, определяющими причинно-следственные связи, существование и функционирование.

Свойство **целостности** состоит в том, что система — это не просто множество подсистем, а целостный объект, допускающий различные варианты декомпозиции на подсистемы. Система не тождественна ни одному варианту ее декомпозиции. При декомпозиции системы на подсистемы нельзя допустить потери общесистемных свойств.

Свойство **змерджентности** (англ. emergence — появление, emergency неожиданное появление), заключающееся в несводимости свойств системы к составляющим ее подсистем.

Свойство **автономности** заключается в том, что каждому классу систем назначается автономная метрика, связанная с понятием расстояния между элементами системы, подсистемами или различными системами.

Расстоянием d для множества V_i называется функция вида

$$d: V_i \times V_i \rightarrow R$$

где R — множество действительных чисел.

Функция d удовлетворяет следующим аксиомам:

$d(x, y) \geq 0$ (аксиома неотрицательности)

$d(x, y) = 0$, если $x = y$ (аксиома невырожденности)

$d(x, y) = d(y, x)$ (аксиома симметрии)

$d(x, y) + d(y, z) \geq d(x, z)$ (аксиома треугольника),

тогда (V_i, d) называется *метрическим пространством*, где $x, y, z \in V_i$.

Обычно расстояние между системами измеряется в *функциональном пространстве* соответствующей размерности. Процессы в системах развиваются во времени, которое может быть автономным и отличаться от реального астрономического времени.

Каждый класс физических явлений, происходящих в системе, отождествляется с определенным набором *инвариантов*. Если инварианты не изменяются при взаимодействии подсистем (значение их остается постоянным и допускается только его перераспределение между подсистемами), то речь идет о **законах сохранения**. Возможен закон сохранения любого произвольного свойства системы (вещества, энергии, импульса, момента количества движения и т.п.).

Обобщенное дифференциальное уравнение переноса, описывающее в общем виде закон сохранения некоторого свойства Γ , имеет вид:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\Gamma) + \text{div}(\rho v\Gamma) = \text{div}(D\text{grad}(\Gamma)) + S$$

где D — коэффициент диффузии; S — источник (сток); ρ — плотность потока; v — объемный расход. Конкретные выражения D и S зависят от процесса. Уравнение содержит четыре члена: первый — нестационарный, второй — конвективный, третий — диффузионный, четвертый — источник (сток).

Одним из фундаментальных свойств систем является сложность.

Конкретное содержание этого понятия зависит от типа систем и решаемой задачи. В широком смысле слова термин «сложность» означает наличие множества различных объектов, находящихся в различных отношениях.

Таким образом, характеристикой сложности объекта может быть количество различных частей и мера их взаимосвязи. Применительно к ХТС их сложность можно понимать как число различных элементов и подсистем, образующих систему, и способов взаимодействия между ними.

При работе со сложными системами наиболее важно допущение неточности при описании данных (постулат неопределенности).

Общие принципы оценки сложности систем следующие. Сложность системы пропорциональна объему информации, необходимой для описания системы.

1.2. Классификация систем

Классификация — это объединение множества объектов в группы (классы, кластеры) по признакам их сходства, аналогии. Классификация позволяет раскрыть сущность классифицируемых объектов. Для того чтобы классифицировать системы, необходимо выделить *классифицирующие признаки* и *критерии классификации*. Если признак единственный, то классификация называется **монотетической** если признаков несколько — то **политетической**.

Признаки, по которым производится классификация, должны быть измерены. **Измерение признака** — это соотнесение его с некоторой шкалой. Измерение может осуществляться в разных шкалах.

Наиболее простой шкалой является **номинальная**, когда признак принимает так называемые номинальные значения, то есть просто называется. Пример: признак "способ организации технологических процессов в системах" может принимать только два значения — "периодический" и "непрерывный". По **этому** признаку ХТС можно декомпозировать на два класса: «*системы периодического действия*» и «*системы непрерывного действия*».

Более информативной шкалой является **порядковая**, при измерении признаков в этой шкале можно **ранжировать** (упорядочить) их значения, но невозможно ввести **метрику**, то есть ответить на вопрос "на какую величину отличаются два непосредственно следующих друг за другом значения признака?".

Наконец, при измерении признаков в **количественной (метрической)** шкале можно не только упорядочить значения признаков, но и ввести метрику.

Возможны два различных способа классификации систем: по типу образующих систему элементов и подсистем; по типу отношений между элементами и подсистемами. Когда речь идет о ХТС, то имеется в виду первый тип классификации, выделяющий ХТС как подкласс из более широкого класса систем.

В *основу классификации систем* можно положить:

тип временной шкалы T ;

тип входных X , выходных Y переменных и состояний Z (начальное состояние):

тип отображений F, G .

По *типу временной шкалы* различают:

системы с непрерывным временем (параметры изменяются во времени непрерывно, время T функционирования системы совпадает с множеством действительных чисел);

системы с дискретным временем (параметры изменяются скачкообразно в дискретные моменты времени, $T = \{t_k; k=0, 1, \dots, t_{k-1} < t_k\}$).

ХТС непрерывного действия принадлежат к системам первого типа; ХТС периодического действия имеют признаки систем как первого, так и второго типа.

По типу X, Y, Z различают системы в которых X, Y, Z могут, принимать либо конечное, либо бесконечное число **значений**.

По типу отображений F, G : отображения могут быть функциями, функционалами, функциональными операторами.

Функцией называется правило соответствия одного множества чисел другому их множеству.

Функционал — правило соответствия множества функций множеству чисел.

Функциональный оператор — правило соответствия одного множества функций другому их множеству. Последний тип отображения представляет наибольший интерес, так как **модель системы** есть правило соответствия множества состояний множеству входов и множества выходов — множествам входов и состояний (формулы 1, 2), то есть модель системы является функциональным оператором.

Система называется **консервативной**, если выполняются законы сохранения. В противном случае система называется **диссипативной**. в диссипативных системах имеют место так называемые необратимые процессы и происходит диссипация субстанций в среду (ранее говорили о процессе их *деградации*). Кроме того, консервативные системы *симметричны* относительно операции обращения времени, а диссипативные — *несимметричны* относительно нее. Пример диссипативной системы: химическая реакция $A \rightarrow P$, скорость которой по компоненту A выражается формулой $dCA/dt = -kCA$, при обращении времени t_2 получаем $dCA/dt = kCA$ (концентрация продукта возрастает).

Система может содержать элементы, как с сосредоточенными параметрами, так и с распределенными. В **системах с сосредоточенными параметрами** переменные имеют определенные значения, которые одинаковы для всех точек пространства (например, реактор идеального смешения (РИС)); в **системах с распределенными параметрами** значения переменных есть функции координат (пример реактор идеального вытеснения (РИВ)). Системы могут быть **стационарными**, когда значения их параметров не изменяются во времени (например, нормальный режим работы РИС или РИВ) и **нестационарными**, когда параметры являются **Функциями** времени (например, реактор периодического действия (РПД)). С позиций моделирования наибольший интерес представляет классификация ХТС по **способу организации технологических процессов**. По этому признаку выделяются два класса систем: системы **непрерывного действия** (англ. continuous processes system) и системы **периодического действия** (англ. batch processes system). Основным элементом первых систем является технологический аппарат непрерывного действия; вторые обычно содержат аппараты периодического и полунепрерывного действия. Способ организации технологических процессов оказывает существенное влияние на структуру и режим функционирования ХТС. Сравнительные характеристики ХТС двух этих типов приведены в таблице

№		Класс ХТС	
п/п	Признак	непрерывного действия	периодического действия
1	Объем производства	Крупнотоннажные	Малотоннажные
4.	Ассортимент продукции	Фиксированный	Непостоянный
3	Число продуктов в одной технологической системе	1	>1
4	Временной режим процессов	Непрерывные	Технологические — непрерывные, организационные — дискретные
5	Временной режим работы технологических аппаратов	Непрерывный	Периодический
6	Тип структуры	Фиксированная	Трансформируемая
7	Тип технологического оборудования	Преимущественно специализированное	Преимущественно стандартное
8	Способ увеличения степени завершенности процесса	Организация рециклов	Увеличение продолжительности процесса

Признаками непрерывного процесса являются стационарность объекта в основных рабочих режимах, совмещенность во времени основного технологического процесса и транспорта вещества. **Признаками периодического процесса** являются: существенная нестационарность, цикличность функционирования технологического оборудования, разделенность во времени основных технологических и транспортных операций.

В соответствии с перечисленными признаками все технологические аппараты можно разделить на *четыре группы*: аппараты периодического, непрерывного, полупериодического и полунепрерывного действия. Аппаратом непрерывного действия назовем такой технологический аппарат, в котором перечисленные выше признаки непрерывного процесса справедливы для всех технологических потоков, связанных с этим аппаратом.

Аппаратом периодического действия будем называть технологический аппарат, у которого признаки периодического процесса справедливы для всех технологических потоков, связанных с этим аппаратом.

У аппаратов полупериодического действия для одних потоков справедливы признаки периодического, а для других непрерывного процесса.

Для **аппаратов полунепрерывного** действия справедливы признаки непрерывного процесса для всех технологических потоков, но аппараты работают в циклическом режиме, в котором технологический процесс прерывается состоянием ожидания.

Если все аппараты в ХТС работают в непрерывном режиме, то будем называть такую систему **системой непрерывного действия**, а если система содержит аппараты периодического действия (только или наряду с аппаратами других перечисленных выше типов), то назовем такую **систему системой периодического действия**.

В системах периодического действия протекают непрерывные нестационарные технологические процессы, упорядоченная последовательность которых образует **технологическую стадию многостадийного процесса**. **Элементарный технологический процесс** в аппарате периодического действия можно определить как функциональное состояние аппарата (англ. functional state). Пребывание аппарата периодического действия в каждом функциональном состоянии имеет место в течение некоторого конечного интервала времени. Результатом завершения любого функционального состояния аппарата является так называемое *событие* (англ. event).

События бывают двух видов: а именно, **события состояния** и **события времени**. **События состояния** (англ. state event) наступают в результате достижения режимным параметром некоторого (например, заранее фиксированного или оптимального) значения. Поэтому события состояния всегда являются функцией предшествующего состояния.

События времени (англ. time event) наступают в результате истечения определенного интервала времени и, следовательно, не связаны с предшествующим состоянием аппарата.

Это различие событий имеет принципиальное значение при моделировании систем, так как моменты наступления события времени априори известны, и можно сформировать календарь этих событий, в то время как моменты наступления событий состояния заранее не известны, и требуется специальный алгоритм для их определения.

Таким образом, в аппаратах, а, следовательно, системах периодического действия имеет место **процесс смены функциональных состояний**, представляющий собой дискретный последовательный процесс, так как изменения состояния наступают последовательно в дискретные моменты времени.

Процесс называется **последовательным**, если событие **a** наступает вследствие события **b** (или событие **b** является **причиной** события **a**).

Например, химическая реакция в реакторе периодического действия может явиться следствием нагревания реагентов, а нагревание в таком случае предшествует химической реакции. В этом смысле процессы «нагревание реагентов» и «химическая реакция» являются последовательными.

Отношение предшествования (следования) является базовым отношением между событиями и состояниями в системах дискретного (и дискретно-непрерывного) типа.

Временной режим работы аппаратов периодического действия в составе ХТС графически изображают в виде так называемых **графиков Гантта**.

На графике Гантта по оси абсцисс отложено время, а ось ординат соответствует элементам технологической системы, расписание работы которой изображает график Гантта. Каждому элементу системы соответствует прямая, параллельная оси времен. Интервалы времени, в течение которых данный элемент системы активен, изображаются утолщенными отрезками прямой.

Пример. На рис.3 изображена ХТС периодического действия, а на рис.4 — временной режим работы ее аппаратов.

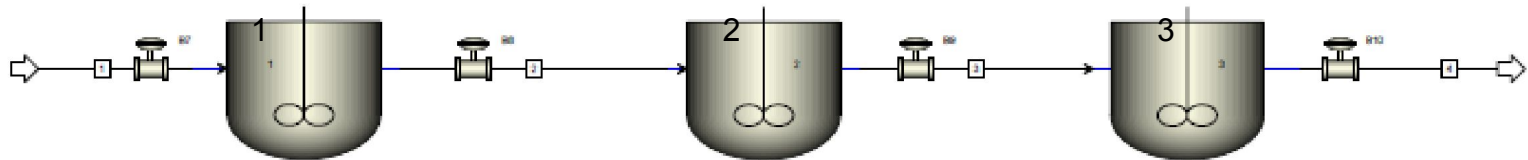


Рис.3. Схема ХТС периодического действия.

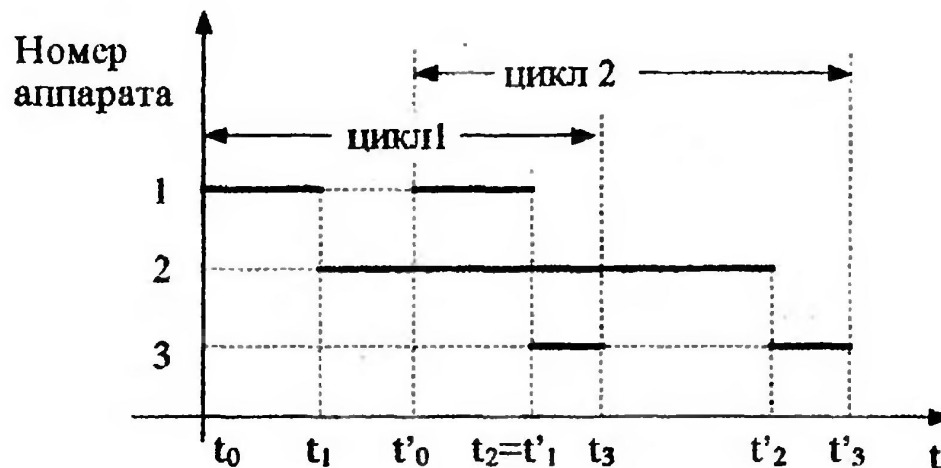


Рис.4. График Гантта расписания работы ХТС, изображенной на рис.3

На графике Гантта (рис.4) изображены два последовательных цикла работы ХТС (первый цикл $[t_0, t_3]$, второй — $[t'_0, t'_3]$). Моменты времени t_0, t_1, t_2, t_3

являются моментами начала и окончания технологических операций в аппаратах в пределах первого цикла ХТС. Моменты времени t'_0, t'_1, t'_2, t'_3 — соответственно моментами начала и окончания операций в тех же аппаратах в пределах второго цикла ХТС.

В процессе работы ХТС периодического действия, составляющие ее аппараты, вступают во взаимодействия в течение определенных интервалов времени. Это так называемые **интерактивные операции**, то есть такие, в которых участвует не менее двух аппаратов (в противном случае процессы называются **автономными**). Если рассматривать ХТС периодического действия в целом, то в системе кроме рассмотренных выше дискретных последовательных процессов происходят также другие *дискретные процессы*: параллельные, альтернативные, конкурирующие.

Процессы называются **параллельными**, если ни один из них не является следствием других или причиной других. Процессы называются **альтернативными**, если из их множества может происходить один или некоторое их подмножество. Процессы называются **конкурирующими**, если из их множества может происходить только один, а остальные должны быть запрещены.

Например, два автономных процесса в различных не взаимодействующих между собой аппаратах периодического действия могут быть *параллельными*, так как они взаимно независимы, то есть один из них может начаться как одновременно с другом, так и раньше или позже него. Типичным примером *альтернативных процессов* может явиться транспортирование массы из одного или одновременно из нескольких подающих аппаратов в один принимающий; *конкурирующих процессов* — транспортирование массы только из одного аппарата, принадлежащего к группе подающих аппаратов, в один принимающий (при этом передача массы из других подающих аппаратов должна быть запрещена). Как видно из вышеизложенного, *способ организации технологических процессов* в ХТС — важный признак, который является причиной их отдельного рассмотрения как объектов математического моделирования. Определим также другие *классификационные признаки*. Очевидно, что некоторые из рассмотренных далее признаков имеют смысл для систем как непрерывного, так и периодического действия, другие только либо для непрерывных, либо только для периодических систем. Одним из общих признаков ХТС является *количество производимых в них продуктов*, в соответствии с которым системы подразделяются на **однопродуктовые и многопродуктовые (полифункциональные)**.

Важным классификационным признаком является *тип структуры системы*. Для систем непрерывного действия важно различать системы разомкнутые и замкнутые. Система называется **разомкнутой**, когда выходы предыдущих по ходу технологического потока аппаратов являются входами только последующих. Система называется **замкнутой (или системой с рециклами)**, если часть выходных потоков некоторых последующих аппаратов являются входами предыдущих по ходу основного технологического потока аппаратов. В свою очередь, системы обоих типов (разомкнутые и замкнутые) могут иметь как последовательную структуру, так и более сложную. Если все выходы каждого предшествующего аппарата являются входами только непосредственно следующего за ним аппарата, то системы имеют **последовательную** структуру; если несколько аппаратов имеют общий вход, то структура называется **параллельной**. Возможны комбинации последовательных и параллельных элементов системы, в связи с чем, выделяются системы с **параллельно-последовательной** и **последовательно-параллельной** структурой. Если выходы одних аппаратов являются произвольными входами других, то говорят о системах с **произвольной** структурой.

1.3. Методологические отличия систем

В основе организации, порядка, имеющего место в любом объекте, называемом системой, лежат общепризнанные принципы *детерминизма (причинности)*. Все формы реальных взаимосвязей явлений складываются на основе всеобщей действующей причинности, вне которой не существует ни одно явление действительности. **Причинность** есть такая связь явлений, в которой одно явление (причина) порождает другое (следствие).

В основе функционирования ХТС лежит причинно-следственная связь. В теории систем принято различать следующие основные понятия: **вход** $X = \{x_1, \dots, x_m\}$ как воздействие среды на систему (*причина*); **выход** $Y = \{y_1, \dots, y_n\}$ — воздействие системы на среду (*следствие*); $Z = \{z_1, \dots, z_k\}$ — **состояние**, проявляющееся в виде физико-химических характеристик процесса.

Например, изотермический реактор идеального смешения непрерывного действия, в котором протекает реакция $A \xrightarrow{k} P$ имеет вход $X = \{v, c_{Aвх}, 0\}$ выход $Y = \{v, c_A, c_P\}$, состояние $Z = \{v, c_A, c_P\}$ где v — объемный расход; c_A, c_P — соответственно концентрации реагента А и продукта Р.

Понятие состояния системы имеет отношение к закону формирования выхода $Y = F(X, Z)$. Системы, в которых выход однозначно отображается входом и состоянием, называются **детерминированными**, при неоднозначном отображении **индетерминированными**.

Неоднозначность отображения может быть вызвана различными причинами:

- воздействием на систему случайных факторов, обычно не учитываемых при описании системы (системы этого типа называются **стохастическими**).

- недостаточной информированностью о факторах, влияющих на систему, но, возможно, имеющих детерминированный характер (такие системы будем называть **нечеткими**).

Частным случаем стохастического процесса в системе является **хаос**, то есть такое поведение системы, которое невозможно прогнозировать заранее.

При исследовании **индетерминированных** систем используется понятие *нечетких мер*. **Мера** есть закон (правило) соответствия подмножеству множества определенного свойства, то есть мера «измеряет» количество этого свойства в подмножестве. В общем случае мера есть действительное число, определяющее степень правдоподобия реального множества состояний системы

$$\mu : C \rightarrow [0,1]$$

где μ — мера; C — множество возможных состояний системы; $|C|$ — мощность множества C .

Мера с необходимостью обладает следующими свойствами:

$$\mu(0) = 0; \mu(C) = 1,$$

$$\mu(x_2) \geq \mu(x_1) \text{ если } x_1 \subseteq x_2 \text{ (монотонность),}$$

$$\lim \mu(x_1|) = \mu \lim(x_1), \text{ если } x_1 \subseteq x_2 \subseteq \dots \text{ или } x_1 \supseteq x_2 \supseteq \dots \text{ (непрерывность), где } X_i \in C.$$

Свойство 3 справедливо только для непрерывных систем

Из различных нечетких мер наиболее хорошо разработаны *вероятностные меры* (в курсах теории вероятности) и *возможностные меры* (в теории возможности).

Для детерминированных систем в качестве меры используется функция выбора:

$$f_b : C \rightarrow \{0,1\}$$

которая является многомерным отношением на C . Если состояние C входит в перечень реально возможных состояний, то $f_b = 1$, в противном случае $f_b = 0$. Таким образом, функция f_b выбирает состояние системы из множества всех потенциальных ее состояний. Этот выбор дает представление о поведении системы, поэтому функцию f_b называют также функцией поведения.

Пусть реактор периодического действия работает в режиме, когда исходные реагенты имеются в достаточном количестве, а продолжительность цикла фиксирована и равна определенному значению. В этих условиях реактор может работать без простоев, хотя принципиально возможны два состояния: «реактор находится в рабочем режиме» и «реактор пустой и находится в режиме ожидания». Включим в перечень возможных состояний первое и исключим второе. Тогда функция f_b будет выбирать из двух возможных состояний, принимая значение 1 для состояния работы и 0 — для состояния ожидания. Значение функции f_b для любого состояния детерминированных систем принимает одно из двух возможных значение: 0 или 1.

Для вероятностных систем справедливы формулы

$$f_b : C \rightarrow [0,1]$$

$$p(X) = \sum_{c \in X} f_b(c)$$

где $X \in |C|$, $p(X)$ — функция распределения вероятностей.

Представим реактор периодического действия, на вход которого в случайные моменты времени поступают порции сырья, а продолжительность цикла реактора есть случайная величина. Очевидно, что в любой момент времени t реактор может находиться в одном из двух состояний: либо в нем идет технологический процесс, либо он свободен и готов к приему одной порции сырья. Каждое из двух возможных состояний характеризуется вероятностью $f_{bi}(t)$. При $t \rightarrow \infty$ состояние для стационарного процесса не зависит от времени и равно f_{bi} . Вероятность f_{bi} может принимать любое значение из диапазона $[0,1]$. Тогда

$$p(X) = \sum_{c \in X} f_b(c) \quad p(X) = f_b(c_1) + f_b(c_2).$$

Для **возможностных систем** имеют место следующие зависимости:

$$\pi; C \rightarrow [0,1]; \quad \pi : (\otimes) = 0; \quad \pi(C) = 1;$$

$$\pi\left(\bigcup_i X_i\right) = \max_i(\pi(X_i)); \quad \pi(X) = \max_{c \in X}(f_b(c)); \quad \text{где } x_i \in C.$$

где π называется **функцией распределения возможностей**

Предположим, что продолжительность технологического процесса в реакторе периодического действия есть фиксированная величина, но по некоторым причинам (например, из-за отсутствия сырья, которое поступает регулярно, но в недостаточном количестве) система может находиться в одном из двух возможных состояний: состоянии работы или состоянии ожидания. Из опыта эксплуатации известна функция принадлежности нахождения реактора в одном из возможных состояний $f_b(c)$.

Тогда

$$\pi(X) = \max_{c \in X} (f_b(c)) = \max\{f_b(c_1), f_b(c_2)\}.$$

Так как для детерминированных систем значения возможных состояний равны либо 0, либо 1, то функция выбора может быть названа **четкой функцией распределения возможностей**.

2.1. Принцип моделируемости

Принципиально возможны два различных *способа изучения объектов*: непосредственно (в результате натурального эксперимента) и по модели.

Последний способ является единственно возможным при изучении сложных объектов, к которым, в частности, относятся ХТС.

Моделирование как метод научного исследования состоит в получении и обработке информации об изучаемых объектах на основе изучения некоторых других объектов, замещающих интересующие нас объекты на некоторых этапах познания. Эти объекты называются *моделями* (от лат. *modulus* — мера). Тогда исходные объекты, являющиеся целью изучения, называются *оригиналами*. Таким образом, модель — это объект-заместитель объекта-оригинала, позволяющий изучить некоторые свойства последнего. Процесс замещения исходного объекта (оригинала) другим объектом (моделью) называется **моделированием** (англ. *simulation*). При моделировании эксперимент проводится не на оригинале, а на замещающей его модели, и называется модельным экспериментом (в отличие от натурального). Теория, на основе которой происходит замещение объектов-оригиналов их моделями, называется **теорией моделирования**. Процесс моделирования возможен на основе свойства систем, называемого аналогией. **Аналогия** — это суждение о сходстве двух сравниваемых объектов. В процессе изучения оригинала по его модели модель рассматривается как относительно самостоятельный объект, на основании эксперимента с которым удастся получить знания о самом объекте.

Пример. Изучаемый объект — изотермический химический реактор периодического действия, в котором протекают консекутивные (последовательные) реакции



Цель изучения — определение закона изменения концентрации реагента А, а также продуктов Р и S во времени, определение оптимальной продолжительности технологического процесса.

Тогда натурный эксперимент состоит в проведении реакции, отборе проб и их анализе либо непрерывно, либо в дискретные моменты времени, а модельный эксперимент — в формировании модели, которой в данном случае является система уравнений материального баланса, и ее решении.

Таким образом, моделью изотермического периодического реактора является система обыкновенных дифференциальных уравнений. Если результаты моделирования совпадают с результатами, которые могли бы быть получены непосредственно на изучаемом объекте и по ним можно прогнозировать поведение (функционирование) последнего, то модель называется адекватной. Адекватность модели — понятие относительное, адекватность зависит от цели моделирования. Понятно, что модель отражает не все свойства оригинала, а только некоторые, наиболее существенные для поставленной цели. Иначе не было бы смысла выполнять моделирование.

Основополагающим принципом, на основе которого возможно моделирование, является *принцип изоморфизма*,

Пусть имеются две системы $S_1 = \{X_1, R_1\}$, $S_2 = \{X_2, R_2\}$, где X — множество элементов, R — *характеристическое множество* (множество отношений между элементами). Тогда две системы S_1 , S_2 называются изоморфными, если:

- между элементами X_1 , X_2 можно установить взаимно однозначное (биективное) отношение, то есть такое, когда каждому элементу множества X_1 соответствует элемент множества X_2 и, наоборот, каждому элементу множества X_2 соответствует элемент множества X_1 ;
- между элементами множества R_1 , R_2 можно установить взаимно однозначное соответствие, то есть каждому элементу из R_1 , выражающему ориентированное отношение между двумя элементами из X_1 , соответствует элемент из R_2 , который выражает то же самое отношение между элементами из X_2 , и наоборот.

Таким образом, нами определено отношение между двумя системами S_1 , S_2 , которое называется отношением изоморфизма S_1 и S_2 . Отношение изоморфизма обладает свойствами *симметрии* $(S_1 \text{ и } S_2) \rightarrow (S_2 \text{ и } S_1)$ и *транзитивности* $(S_1 \text{ и } S_2) \cup (S_2 \text{ и } S_3) \rightarrow (S_1 \text{ и } S_3)$ где \cup обозначает объединение множеств.

На практике сформировать модель S_2 , полностью изоморфную изучаемой системе S_1 , невозможно. Обычно ограничиваются *частично изоморфными* или *гомоморфными* моделями. Две системы S_1 и S_2 называются гомоморфными, если выполняется одно из следующих условий:

- если часть системы S_1 изоморфна системе S_2 , то есть $S_2 \text{ и } S_3$, где $S_3 \subset S_1$ (это условие записывается так: $S_2 \text{ h } S_1$);
- если часть системы S_2 изоморфна системе S_1 , то есть $S_3 \text{ и } S_1$, где $S_3 \subset S_2$ (это условие записывается так: $S_2 \text{ h } S_1$).

Отношение гомоморфизма *несимметрично*.

С учетом вышеизложенного можно *определить формально процесс моделирования*. Пусть имеется подлежащая изучению система $S=\{X,R\}$ (например, химико-технологическая), характеризующаяся элементами X и отношениями R между ними и отображением $Y=F(X)$ и пусть имеется другая система $M=\{x,r\}$, где x, r — соответственно ее элементы и отношения между ними, и отображением $y=f(x)$. Тогда M является моделью S тогда и только тогда, когда M либо изоморфна S , либо гомоморфна ей. В первом случае M называется **изоморфной моделью (или изоморфом) S** , во втором случае ее **гомоморфной моделью (или гомоморфом)**.

Моделирование систем изучается в основном разделе математической дисциплины, называемой *теорией систем*. Принципиальная возможность моделирования систем (в том числе химико-технологических) следует из практического опыта работы с ними и, следовательно, наличия определенной информации о них. В теории моделирования систем постулируется основополагающий принцип, называемый принципом моделируемости и, состоящий в том, что любая система S (в том числе ХТС) представима конечным множеством моделей $\{M\}$.

Моделирование систем изучается в *теории систем*. В теории моделирования систем постулируется основополагающий принцип, называемый **принципом моделируемости и**, состоящий в том, что любая система S (в том числе ХТС) представима конечным множеством моделей $\{M\}$. Необходимость постулата дополнительности вызвана ограниченностью средств познания и отображения реальности.

Природа едина и цельна, но отражение ее свойств в нашем **представлении** неоднозначно и ситуационно. Наблюдатель воспринимает одни грани сущности в одних условиях и другие ее грани в других.

Для изменения поведения системы требуется изменение внешнего воздействия, превышающее некоторое значение, называемое *порогом*. Порог есть функция трех векторных переменных — количества вещества, количества энергии, количества информации.

Максимально возможная (предельно возможная) точность измерения свойств системы связана с областью неопределенности измерения свойств, присущей данной системе. Внутри этой области увеличение точности измерения одних свойств влечет за собой изменение точности других свойств.

2.2. Цели моделирования

Перед тем как приступить непосредственно к моделированию любых сложных объектов, в том числе ХТС, необходимо прежде всего *сформулировать цель*, с которой выполняется моделирование. Следует помнить, что о модели любой системы можно говорить только в отношении определенной цели моделирования, если цель моделирования неизвестна, то невозможно ответить на вопрос о том, является ли данная формальная система моделью рассматриваемого объекта. Цели, с которыми выполняется моделирование ХТС, могут быть весьма разнообразны, но в основном моделирование выполняется либо с целью *анализа функционирования* действующих, либо с целью *синтеза* вновь проектируемых систем, а также с целью их оптимизации.

Анализ (от греч. — $\alpha\nu\alpha\lambda\nu\sigma\iota\zeta$ разложение, расчленение) химико-технологических систем — это процедура определения состояний $Z(t)$ и выходов $Y(t)$ открытой системы по заданным ее входам $X(t)$ и начальному состоянию Z_0 ; или состояний $Z(t)$ замкнутой системы по его начальным значениям Z_0 .

Процедура анализа выполняется над *моделью системы*, то есть считаются известными отображения F и G — в формулах (1), (2) для открытых систем или отображения — \tilde{F} для замкнутых систем, где $Z(t) = \tilde{F}(Z_0)$.

. (3) Последние утверждения предполагают, что анализируемая система задана, существует, хотя бы мысленно. В выражениях (1) - (3) отображения F , G , могут иметь вид функций, функционалов или функциональных операторов и не обязательно должны быть заданы в явном виде.

В качестве **простейших** примеров анализа систем рассмотрим процедуру определения выхода и состояния изотермических реакторов идеального смешения и идеального вытеснения, а также состояния реактора периодического действия, в которых протекает простая необратимая реакция $A \xrightarrow{k} P$ порядка $n=1$.

Динамическая модель реактора идеального смешения имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dc(t)}{dt} + \frac{v}{V} c(t) + r(t) = \frac{v}{V} c_{in}(t); & c(0) = c_0 \\ r(t) - kc(t) = 0, \end{cases}$$

где c_0 — концентрация реагента A в реакторе в $t = 0$; $c(t)$ — концентрация реагента A на выходе; $c_{in}(t)$ — концентрация на входе; $r(t)$ — скорость реакции; k — константа скорости реакции; V — объем реактора; v — объемный расход; t — время.

Система уравнений (4) — это совместная система, состоящая из неоднородного дифференциального уравнения материального баланса и алгебраического уравнения закона действующих масс. Состояние и выход реактора характеризуются вектором $Z(t)=Y(t)=\{c(t),r(t)\}$, а вход — величиной $c_{in}(t)$.

Статическая модель реактора имеет вид системы алгебраических уравнений

$$\begin{cases} r + \frac{v}{V}c = \frac{v}{V}c_{in} \\ r - kc = 0 \end{cases}$$

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

Динамическая модель трубчатого реактора идеального вытеснения имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{\partial c(t,l)}{\partial t} + \omega \frac{\partial c(t,l)}{\partial l} + r(t,l) = 0 \\ r(t,l) - kc(t,l) = 0 \end{cases}$$

где ω — линейная скорость, при начальном условии $c(0,l)=c_0(l)$ и граничном условии $c(t,0)=c_{in}(t)$.

Условие $c_0(l)$ характеризует начальное состояние реактора, а $c_{in}(t)$ — вход; состояние реактора есть функция $c(t,l)$, а выход — $c(L)$, где L — длина трубчатого реактора.

Статическая модель реактора идеального вытеснения имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{dc(l)}{dl} + r(l) = 0; & c(0) = c_{in} \\ r(l) - kc(l) = 0, \end{cases}$$

где F — площадь поперечного сечения реактора.

Реактор периодического действия представляет собой замкнутую систему, у которой отсутствуют вход и выход. Модель реактора имеет вид совместной системы, состоящей из однородного дифференциального уравнения материального баланса и алгебраического уравнения закона действующих масс:

$$\begin{cases} \frac{dc(t)}{dt} + r(t) = 0; & c(t) = c_0 \\ r(t) - kc(t) = 0. \end{cases}$$

Состояние реактора характеризуется вектором $Z(t) = \{c(t), r(t)\}$, начальное состояние Z_0 — вектором $Z_0 = \{c_0, r_0\}$.

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

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

Процедурой, обратной анализу, является синтез. **Синтез** (от греч. — συντεσις· соединение, сочетание, составление) ХТС — это процедура определения отображений F, G по известным входам $X(t)$ и выходам $Y(t)$.

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

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

Представление — это исследование возможных способов функционирования системы, то есть вида отображений F, G или при заданных входах, выходах и начальном состоянии Z_0 (для открытых систем) или начальном состоянии замкнутых систем.

Среди различных способов функционирования может существовать наилучший, поэтому возможна задача **оптимизации**, состоящая в выборе этого наилучшего варианта.

Оптимизация есть частный случай *задачи представления систем*, при котором из допустимых способов функционирования выбирается наилучший. Обязательным условием задачи оптимизации является наличие степеней свободы у оптимизируемой системы и некоторой функции R от ее состояния, по значению которой можно сравнивать ее различные варианты. В простейшем случае это скалярная функция; она называется *критерием оптимальности*, а соответствующая задача — *задачей однокритериальной оптимизации*

$$\text{Extr}R(X(t), Z_0)$$

$$\text{при } \bar{F}(X(t), Z_0) \begin{matrix} < \\ > \end{matrix} 0,$$

Пример. Определим оптимальное значение времени пребывания реакционной массы в реакторах идеального смешения непрерывного и периодического действия, в которых протекают последовательные реакции $A \xrightarrow{k_1} P \xrightarrow{k_2} S$. *Статическая модель непрерывно действующего реактора идеального смешения имеет вид:*

$$\begin{cases} r_A + \frac{1}{\tau} C_A = \frac{1}{\tau} C_{A,in} \\ r_P - \frac{1}{\tau} C_P = 0 \\ r_A - k_1 C_A = 0 \\ r_P + k_1 C_A - k_2 C_P = 0 \end{cases}$$

Решение этой системы уравнений имеет вид:

$$c_A = \frac{c_{A,in}}{1 + \tau k_1}; \quad c_P = \frac{\tau k_1 c_{A,in}}{(1 + \tau k_1)(1 + \tau k_2)};$$

$$r_A = \frac{k_1 c_{A,in}}{1 + \tau k_1}; \quad r_P = \frac{k_1 c_{A,in}}{(1 + \tau k_1)(1 + \tau k_2)};$$

Определим время пребывания реакционной массы в реакторе идеального смешения, при котором достигается максимальный выход продукта P, применив необходимое и достаточное условия существования экстремума.

Продифференцировав $\psi_P(t)$ по t и приравняв производную нулю, получим:

$$1 - k_1 k_2 \tau^2 = 0 \quad \tau_{opt} = \frac{1}{\sqrt{k_1 \cdot k_2}}$$

Для проверки, действительно ли при значении $\tau = \tau_{opt}$ достигается максимум ψ_P вычислим вторую производную в точке $\tau = \tau_{opt}$

Так как k_1 и k_2 существенно положительные величины, то

$$\left. \frac{d^2 \psi_P(t)}{d\tau^2} \right|_{\tau = \tau_{opt}} < 0,$$

то есть в точке $\tau = \tau_{opt}$ имеет место максимум.

Определим время пребывания реакционной массы в реакторе периодического действия. Модель реактора имеет вид совместной системы дифференциальных и алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} \frac{dc_A(t)}{dt} + r_A(t) = 0 & c_A(0) = c_{A0} \\ \frac{dc_P(t)}{dt} + r_P(t) = 0 & c_P(0) = 0 \\ r_A(t) - k_1 \cdot c_A(t) = 0 \\ r_P(t) + k_1 \cdot c_A(t) - k_2 \cdot c_P(t) = 0 \end{cases}$$

Разрешив подсистему алгебраических уравнений относительно переменных $r_A(t)$ и $r_P(t)$ и подставив полученные решения в подсистему дифференциальных уравнений, получим задачу Коши для системы дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \frac{dc_A(t)}{dt} + k_1 c_A(t) = 0 & c_A(0) = c_{A0} \\ \frac{dc_P(t)}{dt} - k_1 c_A(t) + k_2 c_P(t) = 0 & c_P(0) = 0 \end{cases}$$

Решив эту систему, получим $c_A(t)$, $c_P(t)$:

$$\begin{aligned} c_A(t) &= c_{A0} e^{-k_1 t} \\ c_P(t) &= c_{A0} \frac{k_1}{k_2 - k_1} (e^{-k_1 t} - e^{-k_2 t}) \end{aligned}$$

Подставив полученное решение в алгебраическую подсистему, получим значения

$$\begin{aligned} r_A(t) &= k_1 c_{A0} e^{-k_1 t} \\ r_P(t) &= \frac{k_1^2}{k_2 - k_1} \cdot c_{A0} (k_1 e^{-k_1 t} - k_2 e^{-k_2 t}) \end{aligned}$$

Применив необходимое и достаточное условие экстремума функции $\psi_P = c_P / c_{A0}$, получим значение τ_{opt} , при котором достигается максимальный выход продукта P : ψ_{Pmax}

$$\tau_{opt} = \frac{\ln(k_2 / k_1)}{k_2 - k_1}$$

Обычно требуется, чтобы ХТС удовлетворяла нескольким, часто — противоречивым критериям. В этом случае имеет место задача **многокритериальной оптимизации**, заключающаяся в выборе наилучшего варианта системы.

В отличие от оптимизации по единственному критерию в результате многокритериальной оптимизации обычно находят *область неулучшаемых решений*, которая называется *областью Парето*.

Задача **прогнозирования** состоит в предсказании поведения системы по заданным отображениям F, G или \tilde{F} и начальному состоянию Z_0 . Обычно прогнозируется выход системы $Y(t)$. Так как для открытых систем определено отображение G , связывающее выход с состоянием, то можно выполнять прогнозирование в пространстве состояний.

Например, в модели реактора идеального смешения состояние и выход совпадают. Поэтому, решая приведенную выше систему уравнений (4), можно осуществлять прогнозирование выхода (или состояния) реактора.

Наблюдаемостью называется возможность определить состояние системы по заданным значениям ее входа и выхода. Задача состоит в определении состояния в момент t_i , если известен вход $X(t)$ и выход в момент t_1 $Y(t_1)=Y_1$. Для этого необходимо разрешить уравнение $Y(t)=G(t,Z(t))$ относительно $Z(t)$ для момента времени t_1 . Если размерность уравнения $Y(t)=G(t,Z(t))$ равна размерности $Z(t)$, то есть уравнения системы независимы, то можно определить единственное состояние $Z(t_1)$.

Однако так как множество состояний имеет большую мощность, чем множество выходов $Y(t_1)$, то по значению Y в единственной точке t_1 обычно невозможно определить значение $Z(t_1)$. Поэтому единственному значению Y_1 соответствует множество состояний Z системы, и для определения состояний необходимо иметь информацию о значении выходов в различные моменты времени.

Наблюдаемость зависит от входа $X(t)$. Наблюдаемость называется **полной**, если по выходу $Y[t_0, t_1]$, где $t_0 < t_1$ следует возможность оценки любого состояния в момент t_0 .

Под реконструкцией (**оцениванием**) понимают определение состояния системы в момент t_0 по выходу, наблюдаемому на интервале $[t_1, t_0]$, где $t_1 < t_0$. Эта задача отличается от задачи наблюдаемости только, если функция G явно зависит от t .

На практике встречается также **задача разрешимости формирования специального поведения систем**, удовлетворяющих определенным требованиям к процессу, которые называются **целью**.

Предполагается, что в момент начала формирования входов процесс в системе не удовлетворяет требованиям. Влиять на поведение системы можно только путем воздействия на входы, поэтому во множестве входов выделяют два подмножества X_1 и X_3 . Одно из них называется *возмущениями*, а другое — *управлениями*.

Например, входом в реактор идеального смешения являются объемный расход v и концентрация реагента $c_{вх}$. Допустим, что необходимо обеспечить $c_{вых} = c^0$. Пусть на концентрацию на входе $c_{вх}$ влиять нельзя, а на v — можно; тогда v является управлением, а $c_{вх}$ — возмущением.

Таким образом, имеют дело с **проблемой управления**, то есть с поиском управлений, обеспечивающих достижение заданной цели. Хотя цель налагается на выход, но, используя связь между выходом и состоянием, ее всегда можно представить в виде цели в пространстве состояний.

Проблема устойчивости заключается в ответе на вопрос, будет ли система выполнять свои функции при возникновении возмущений. Пусть назначение системы состоит в преобразовании входа X° , порождающего процесс Z_0 , в выход Y_0 . Пусть процесс X в пространстве состояний не совпадает с процессом X° : $\bar{Z}(t_0) = Z^0(t_0) + \Delta Z(t_0)$.

Процесс Z° называется *невозмущенным*, а процесс Z — *возмущенным*.

Возникает вопрос, сходится ли процесс $\bar{Y}(t_0) = G(t, \bar{Z}(t))$ при $t > t_0$ и $t \rightarrow \infty$ к процессу Y_0 .

