

*Дисциплина*

# **Моделирование химическо-технологических процессов**

*Тема №1*

## **Введение в курс и основные понятия**

*Воробьев Евгений Сергеевич*

# Рекомендуемая литература

1. Кафаров В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии.
2. Дорохов И.Н., Меньшиков В.В. Системный анализ процессов химической технологии.
3. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии

# Цели курса

- 1) Освоить применение методов математического моделирования при анализе и оценке эффективности работы ХТП;
- 2) Сформировать способности выполнения расчеты ХТП с использованием математических моделей, моделирующих систем и современных прикладных программ;
- 3) Показать приемы объединения знаний по физико-химической сущности процессов и методологии построения математических моделей, и методов обработки экспериментальных данных при проведении научных исследований, с последующим анализом результатов;
- 4) Научить навыкам самостоятельного проведения теоретических и экспериментальных исследований с использованием современных компьютерных технологий.

# Задачи курса

- 1) Научиться применять математическое моделирование при анализе и оценке эффективности ХТП;
- 2) Освоить приемы выполнения расчетов химико-технологических процессов с использованием математических моделей, моделирующих систем и современных прикладных программ;
- 3) Познакомиться с основами системного анализа при объединении знаний физико-химической сущности процессов и методологии построения математических моделей, а так же с методами обработки экспериментальных данных при проведении научных исследований и их последующим анализом;
- 4) Получить навыки самостоятельного проведения теоретических и экспериментальных исследований с использованием современных компьютерных технологий.

# Студенты должны

## □ **Знать:**

- методы построения эмпирических и физико-химических моделей химико-технологических процессов;
- методы идентификации математических описаний;
- методы оптимизации химико-технологических процессов.

## □ **Уметь:**

- применять методы вычислительной математики и математической статистики для решения конкретных задач расчета, проектирования, моделирования, идентификации и оптимизации процессов химической технологии;

## □ **Владеть:**

- методами математической статистики для обработки результатов активных и пассивных экспериментов,
- пакетами прикладных программ для моделирования химико-технологических процессов.

# Введение в курс

Для построения моделей исследуемых процессов необходимо уметь построить границы данного объекта – это решает

**Системный анализ** является составляющей частью науки кибернетики, которая возникла еще в Древней Греции, как наука управления кораблем. В средние века она понималась как наука управления финансами и только в середине прошлого века она сформировалась как наука управления.

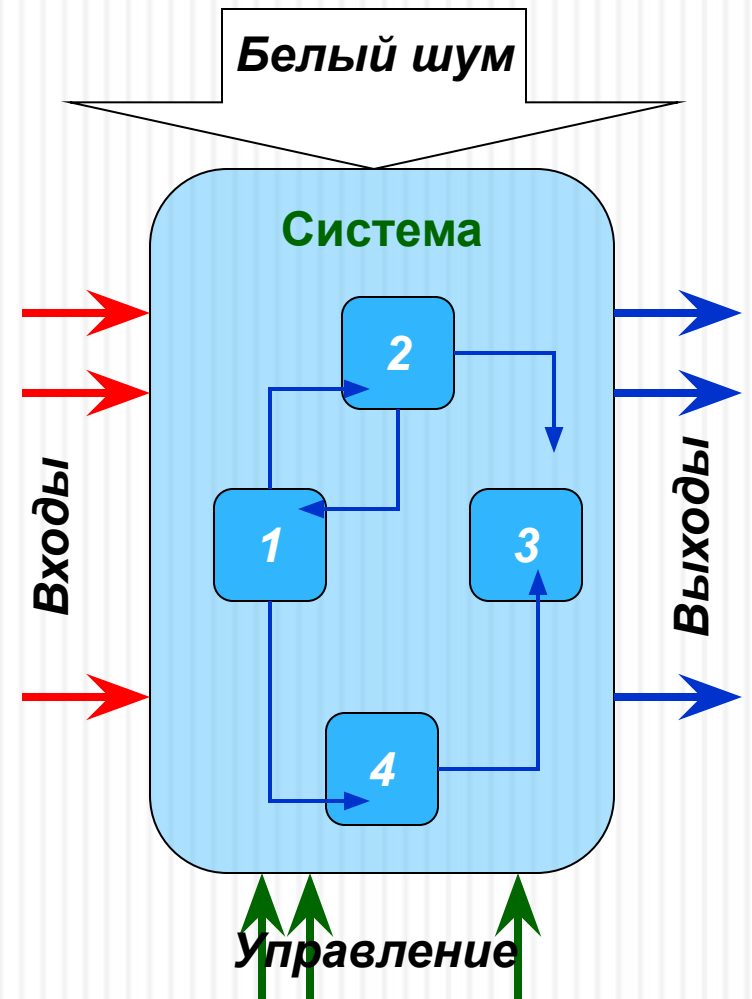
Ее родоначальником стал Норберт Винер, который в 1948 году написал первую книгу, где сформулировал основные принципы кибернетики.

Основными понятиями в ней являются **система (процесс)** и **управления**.

# Понятие системы

Любая реально существующая система состоит из конкретных **объектов** (технические устройства, люди ими управляющие, материальные ресурсы и т.п.). Все эти объекты связаны между собой и с окружающим миром определенными **связями** или **взаимосвязями**, которые представлены в виде сил, потоков энергии, вещества и информации.

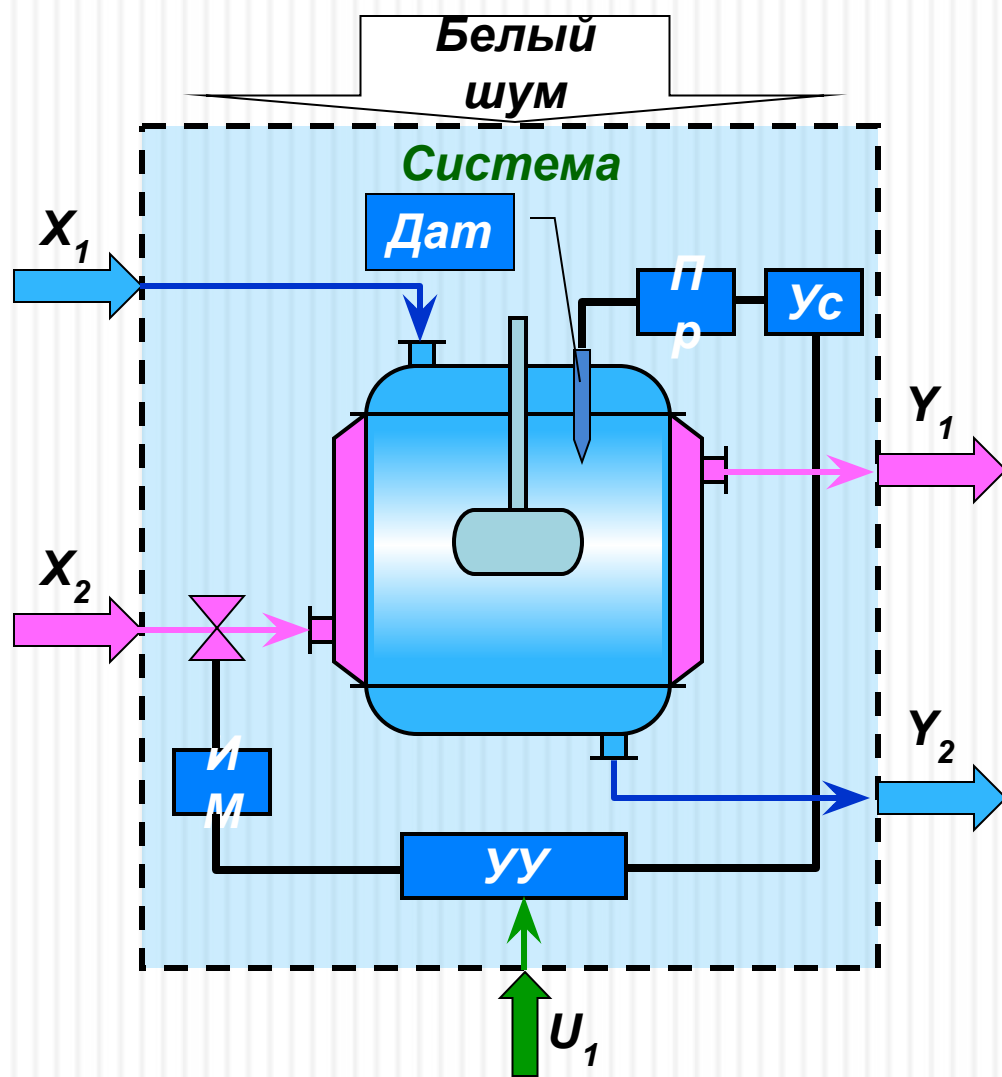
Система – это совокупность объектов или других подсистем связанных единой целью.



# Пример ХТС

Рассмотрим управление типовым аппаратом, в котором поддерживается заданная температура:

- ▣  $X_1$  – сырьё;
- ▣  $X_2$  – теплоноситель;
- ▣  $Y_1$  – продукт;
- ▣  $Y_2$  – вторичное тепло;
- ▣  $U_1$  – управление;
- ▣ *Дат* – датчик температуры;
- ▣ *Пр* – преобразователь;
- ▣ *Ус* – усилитель;
- ▣ *УУ* – управляющее устройство;
- ▣ *ИМ* – исполнительный механизм.





# Классификация систем

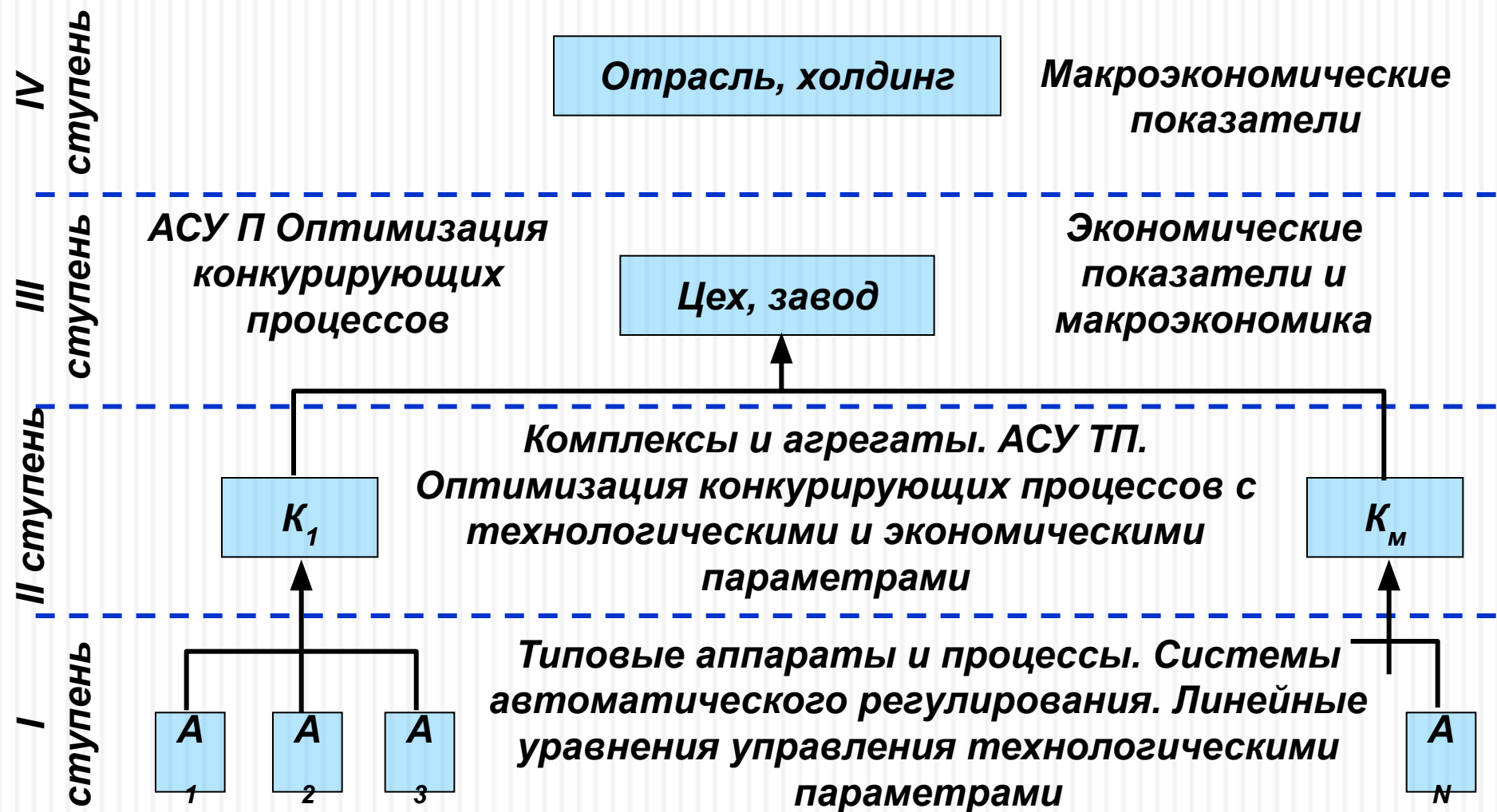
Системы могут быть достаточно сложными, их можно расчленять на части, создавая подсистемы, в которые будут входить только часть элементов основной системы:

**Малые системы** однозначно определяются свойствами процесса и обычно ограничены одним из них (процессов) с его внутренними связями, особенностями аппаратного оформления и функционирования.

**Большие системы** представляют собой совокупность малых систем и отличаются от них количеством и качеством отношения внутренних элементов:

1. определенная целостность, наличие общих целей и назначения;
2. большие размеры и большое число выполняемых функций;
3. сложность поведения;
4. наличие состязательных и конкурирующих сторон (в системе могут протекать противоположно направленные процессы, стремящиеся к снижению эффективности системы в целом);

# Иерархия ХТП



# Управление процессами

Управление предполагает достижение системой поставленной задачи после выполнения ряда заданных процедур.

Управление можно разделить на ряд этапов, которые могут выполняться одновременно или последовательно друг за другом, часть из них может опускаться:

1. Сбор информации;
2. Анализ и принятие решения;
3. Исполнение решения;
4. Контроль исполнения решения.

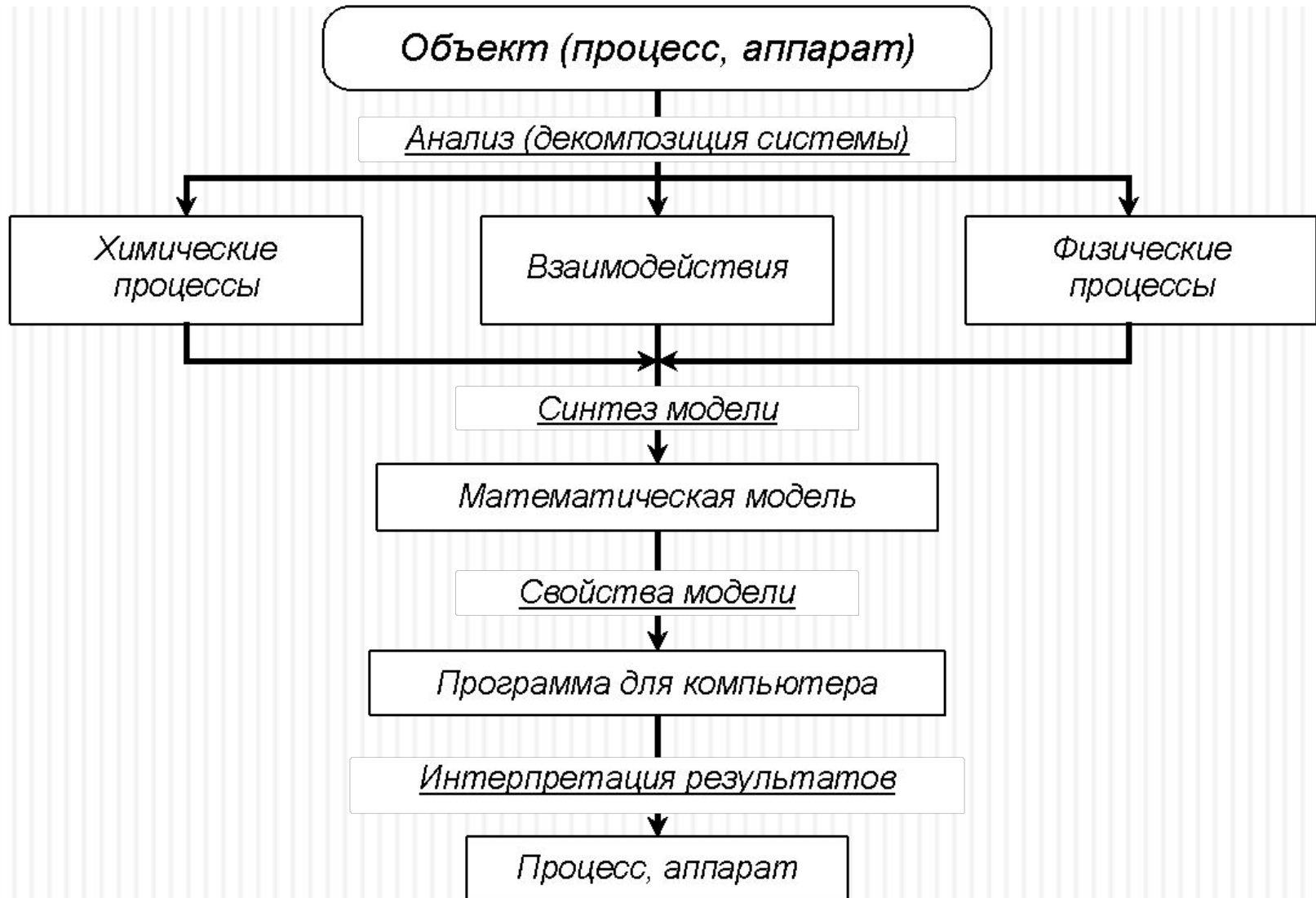
Процессы управление могут быть простыми и сложными. В последнем случае появляется 4 этап в этом процессе, для проверки правильности полученных результатов.

# Классификация процессов управления

Процессы управления могут быть:

- Простыми (одношаговыми) процедурами, которые настолько хорошо освоены, что не требуют больших затрат времени;
- Последовательными процедурами, когда начало следующей процедуры управления начинается только после завершения предыдущей, что делает процесс, хоть и сложным, но реализуемым без привлечения сложной математики;
- Параллельные процессы с управлением конкурирующих процессов, что требует привлечения приемов поиска оптимальных решений;
- Управление в условиях не полной информации (ЧП) с использованием экспертных систем.

# Моделирование химических процессов (аппаратов)



# Системный анализ процессов

Основными задачами системного анализа являются:

- Декомпозиция системы на более мелкие объекты или подсистемы для упрощения их описания математическими зависимостями. Декомпозиция выполняется до получения удовлетворительного описания полученных объектов;
- Синтез математической модели системы на основании построенных моделей объектов и имеющихся между ними связей. В результате получается алгоритм решения поставленной задачи.

Рассмотрим эти задачи более подробно.

# Декомпозиция системы

Рассмотрим построение модели реактора в котором протекает химическая реакция:



Сначала изучаем основной процесс, который определяет функционирование всей системы - это:

- Химическая реакция – проводим ее исследование при фиксированных температурах и строим модель в виде:

Данная модель нас устраивает в условиях проведения опытов в пробирке.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C_A}{\partial t} = -k(T) \cdot C_A \cdot C_B \\ \frac{\partial C_B}{\partial t} = -k(T) \cdot C_A \cdot C_B \\ \frac{\partial C_P}{\partial t} = k(T) \cdot C_A \cdot C_B \\ \frac{\partial C_R}{\partial t} = k(T) \cdot C_A \cdot C_B \end{array} \right.$$

При увеличении объема реактора результаты расчетов перестают нас удовлетворять (возрастают ошибки). Ищем причину в процессах, который становится в данных условиях значимым:

- Тепловые процессы в реакторе. Мы принимали в расчетах температуру сырья, которое поступает в реактор, но там идет химическая реакция и температура начинает изменяться, что приводит к изменению скорости реакции. Добавляем тепловую модель:

$$\frac{dT}{dt} = q_{\text{вход}} + q_{\text{ХР}} + q_{\text{выход}}$$

Вычислив новую температуру с учетом теплоты химической реакции, надо заново пересчитать результаты самой реакции и получить новые тепловыделения, которые повлияют на температуру реакционной среды.

Здесь мы получаем явную взаимосвязь двух моделей и расчет будем вести с использованием итерационных процедур.



Дальнейшее увеличение объема реактора потребует поиска новых процессов, которые повлияют на химическую реакции:

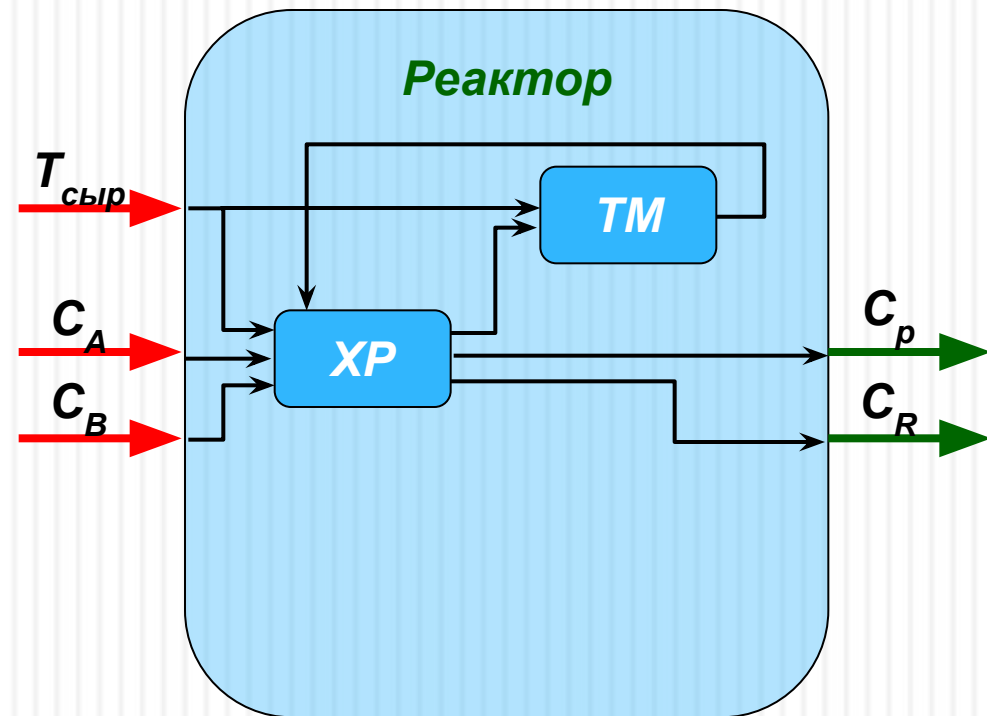
- Модель реактора (РИС, РИВ и т.п.);
- Гидродинамика в реакторе, когда в разных зонах реактора концентрации компонентов будут различными;
- Массообмен вещества, диффузные процессы и т.д.

Все это с одной стороны будет усложнять задачу, но с другой повышать качество математического описания системы. Кажется, что задача становится бесконечной в своем решении.

Это не совсем так, мы на каждом шаге определяем точность нашего решения и как только оно перестает нас устраивать добавляем новую составляющую в модель. В какой-то момент нас просто устроит полученное решение для нашего аппарата, что и будет являться условием завершения процесса декомпозиции.

# Синтез модели

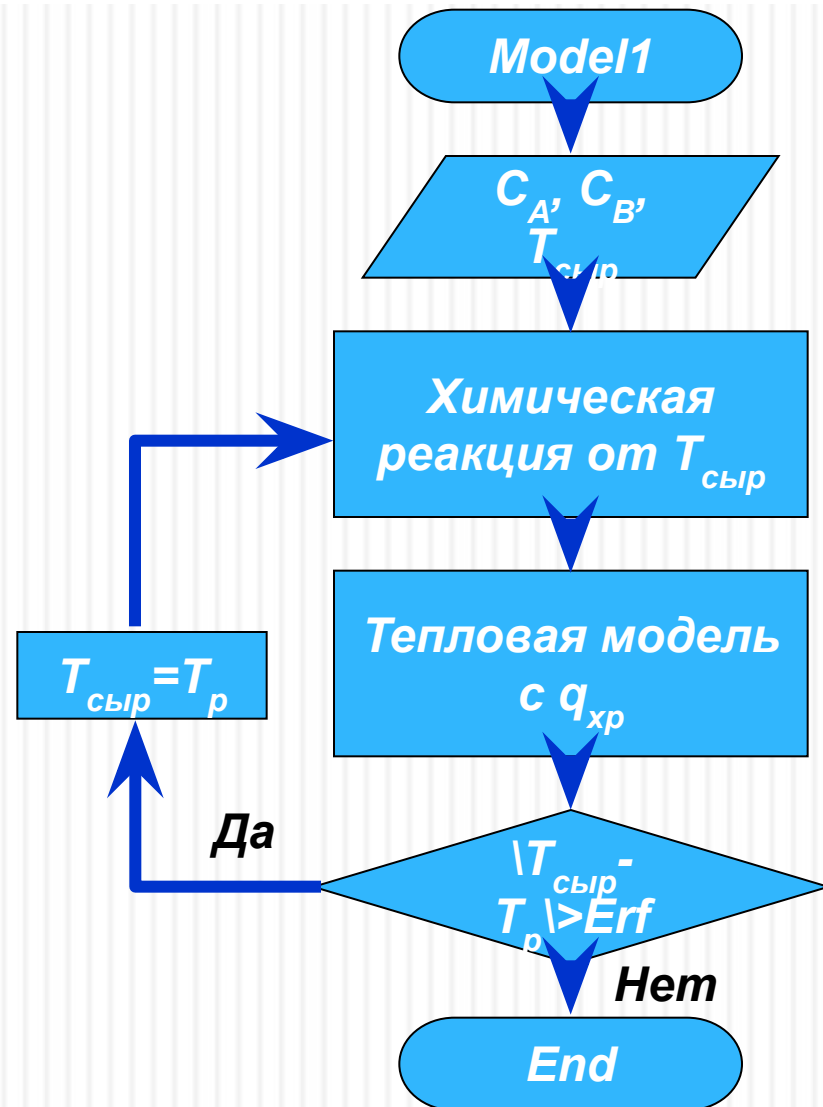
Разделив модель на её составляющие и построив для каждого объекта свою математическую модель мы переходим к построению полной модели системы. Если мы попытаемся решать сразу же все задачи, то скорее всего решения не получим. Для упрощения расчетов на основании построенной схемы формируем алгоритм решения:



# Алгоритм решения

На основании исходных данных (их будет явно больше) вычисляем концентрации продуктов и кол-во выделенного (поглощенного сырья), переходим к расчету температуры реакционной массы на основании данных по приходу сырья, уходу продукта и выделению тепла в химической реакции.

Сравниваем разницу температур и если она больше заданной ошибки повторяем расчет снова.



Если объектов и подмоделей больше, то и алгоритм будет увеличиваться. Например учет модели реактора определит время нахождения вещества в нем и изменить процедуры расчет как химической реакции, так и температуры. Причем надеяться, что реактор будет описываться идеальными моделями (РИС, РИВ) мало вероятно. Скорее всего потребуются специальные исследования самого реактора и потоков в нем, что и позволит решить вопрос использования других моделей. Общие принципы решения этих задач мы рассмотрим далее.

При наличии в аппарате различных зон может потребоваться расчет описанных выше моделей для каждой из зон. Это приведет к решению последовательной задачи для каждой зоны с передачей данных от одной зоны к другой. При наличии между зонами рециклов приведет к новым итерационным процедурам.

# Классификация моделей

Модели могут быть:

- С сосредоточенными параметрами – когда функция не зависит от координат, а используется усредненное значение;
- С распределенными параметрами – когда функция зависит от координат и модель обычно описывается уравнениями в частных производных;
- Статическими – когда функция не изменяется от времени;
- Динамические – когда функция изменяется во времени.

# Математические модели

Обычно используются два типа моделей:

- **Физико-математическая модель**, которая строится на законах природы и несёт в себе физический смысл. Модель содержит основные законы сохранения, глобальные ограничения и преобразования, технологические ограничения;
- **Регрессионная модель**, которая строится на основании простых математических зависимостей, позволяющих легко и просто получать решения и преобразовывать выражения в более сложные. Модели не несут в себе физического смысла и используются для описания локальных областей. Обычно строятся линейные модели и модели второго порядка. Построение более сложных моделей обычно не оправданы.

# Физико-математическая модель

Основу моделей составляют всемирные законы сохранения (массы, энергии, движения и т.п.), которые обычно записываются интегральными или дифференциальными уравнениями, иногда уравнениями в частных производных.

При решении большинства задач нам не хватает этих уравнений и мы к ним добавляем преобразования (плотность – удельный объем, путь – скорость – ускорение и т.п.). Это обычно алгебраические уравнения.

С точки зрения математики в природе нет ограничений, что не так, например абсолютный нуль, температуры фазовых переходов и т.д. Поэтому в модель вводятся глобальные ограничения. Это алгебраические неравенства.

И модель закрывается технологическими ограничениями.

# Регрессионная модель

В качестве уравнения используются одно- и много-параметрические полиномы первого и второго порядка:

$$Y = a_0 + \sum_{i=1 \dots n} a_i \cdot X^i$$

$$Y = a_0 + \sum_{i=1 \dots n} a_i \cdot X_i + \sum_{\substack{i, j=1 \dots n \\ i < j}} a_{ij} \cdot X_i X_j + \sum_{i=1 \dots n} a_{ii} \cdot X_i^2$$

При исследовании модели выбираются границы, за которые модель не может выходить.

В качестве основного метода решения используется **метод наименьших квадратов**. Более подробный алгоритм будем рассматривать далее.



# Однопараметрические полиномы

При изменении степени полинома можно построить кривую любой сложности.

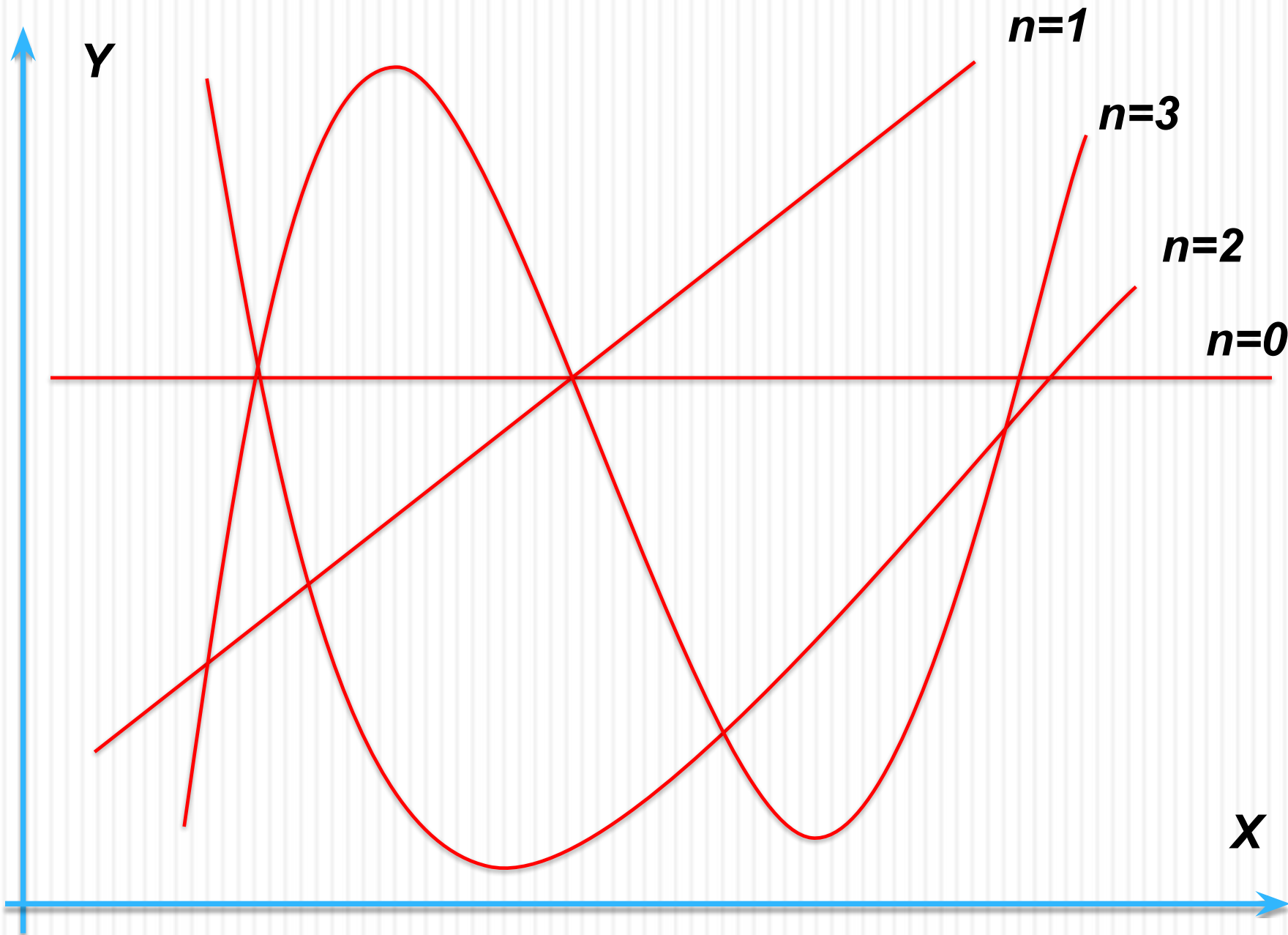
Использование полинома нулевой степени для описания набора экспериментальных данных соответствует среднему значению для этих данных

$$Y = a_0 + \sum_{i=1 \dots n} a_i \cdot X^i$$

$$n = 0 \quad Y = a_0$$

$$n = 1 \quad Y = a_0 + a_1 \cdot X$$

$$n = 2 \quad Y = a_0 + a_1 \cdot X + a_2 \cdot X^2$$



# Многопараметрические полиномы

Обычно используются полиномы до второго порядка, что позволяет получить следующие варианты уравнения:

$$Y = a_0 + \sum_{i=1 \dots n} a_i \cdot X_i + \sum_{\substack{i,j=1 \dots n \\ i < j}} a_{ij} \cdot X_i X_j + \sum_{i=1 \dots n} a_{ii} \cdot X_i^2$$

Многомерный полином первого порядка;

$$Y = a_0 + a_1 \cdot X_1 + a_2 \cdot X_2$$

Неполный полином второго порядка, учитывает связи между входными параметрами;

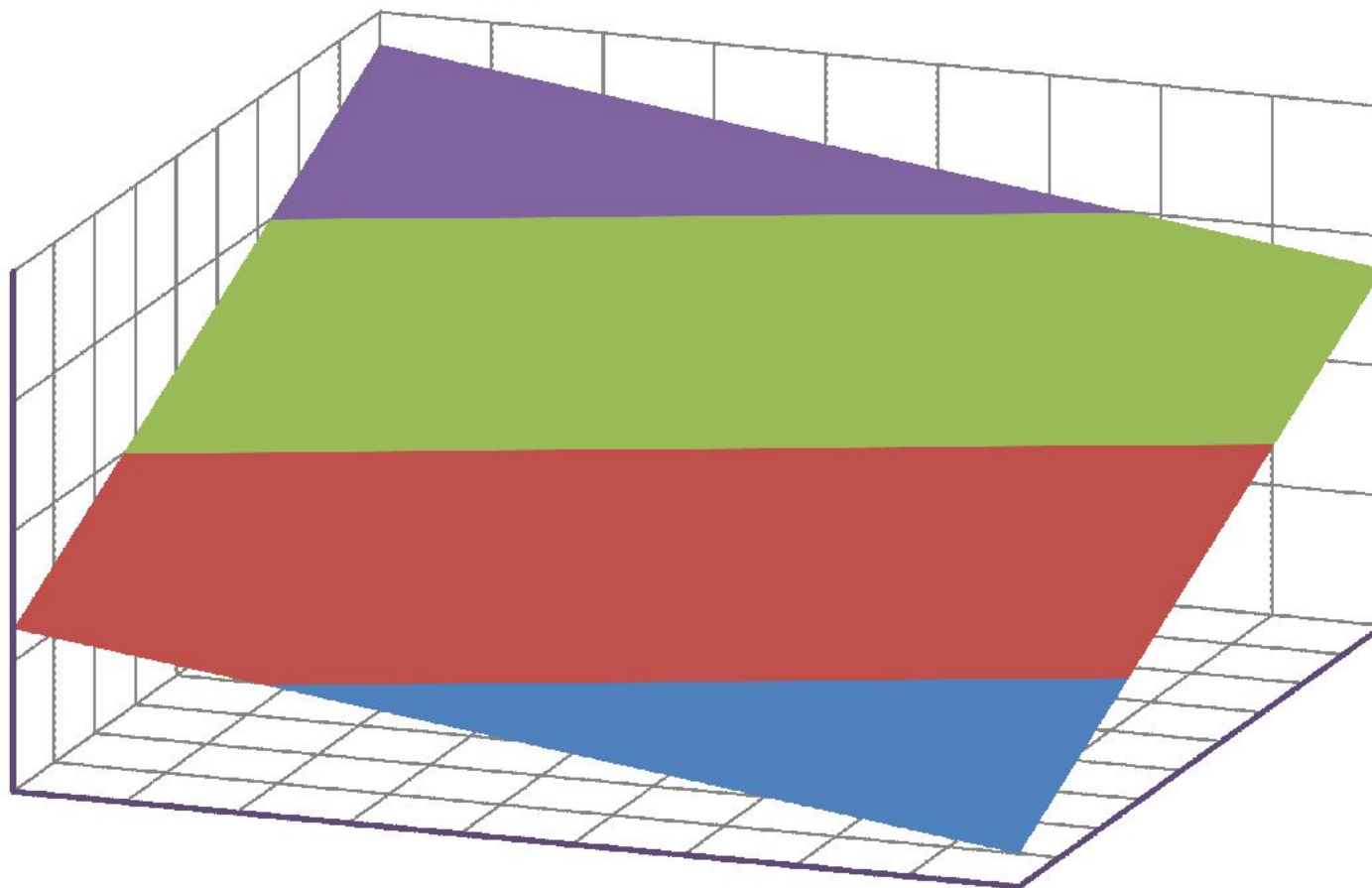
$$Y = a_0 + a_1 \cdot X_1 + a_2 \cdot X_2 + a_{12} \cdot X_1 \cdot X_2$$

Полином второго порядка.

$$Y = a_0 + a_1 \cdot X_1 + a_2 \cdot X_2 + a_{12} \cdot X_1 \cdot X_2 + a_{11} \cdot X_1^2 + a_{22} \cdot X_2^2$$

[Посмотреть](#)

$$Y = a_0 + a_1 \cdot X_1 + a_2 \cdot X_2$$

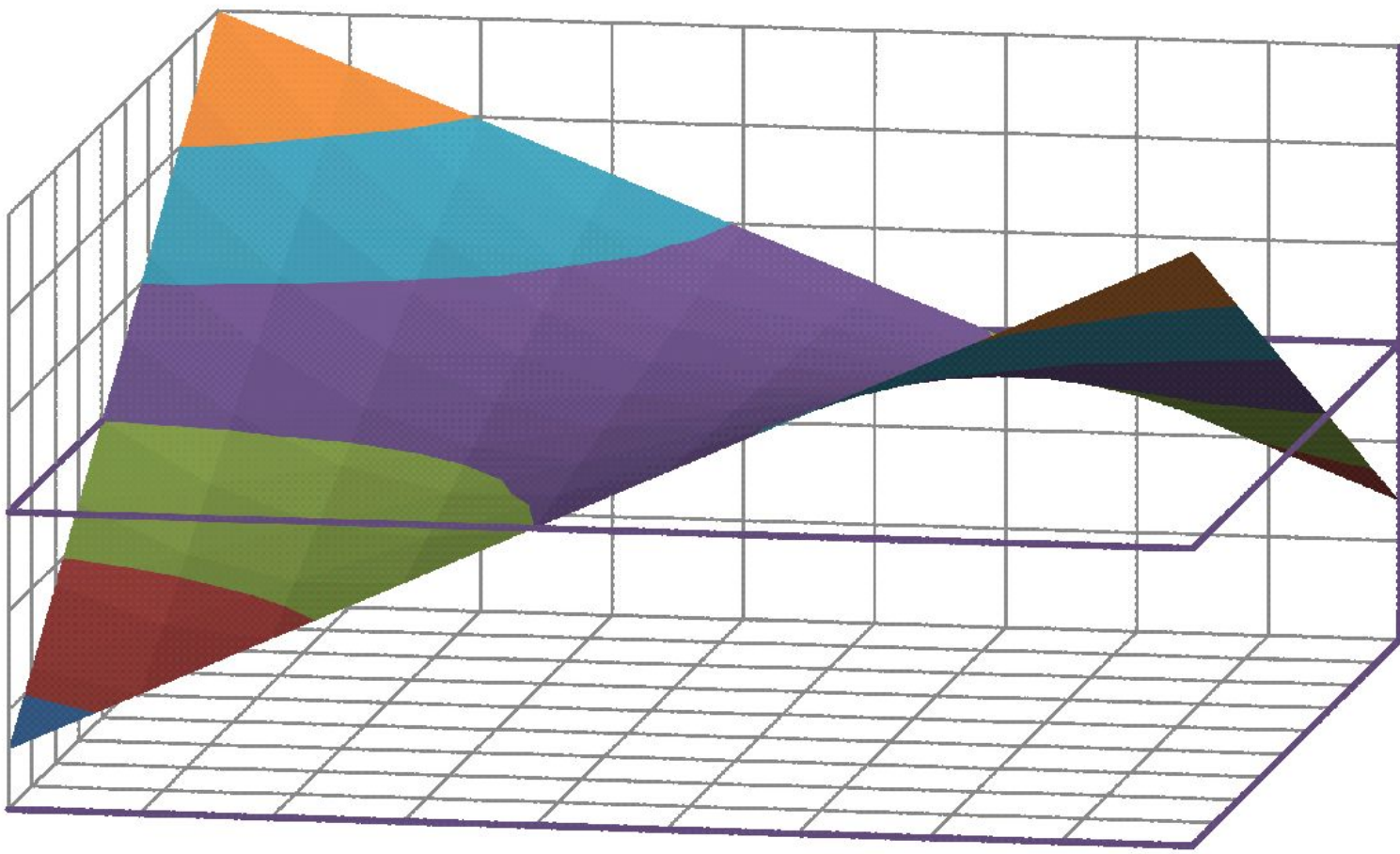
 $X_2$  $X_1$ 

[Посмотреть](#)

$$Y = a_0 + a_1 \cdot X_1 + a_2 \cdot X_2 + a_{12} \cdot X_1 \cdot X_2$$

X1

X2

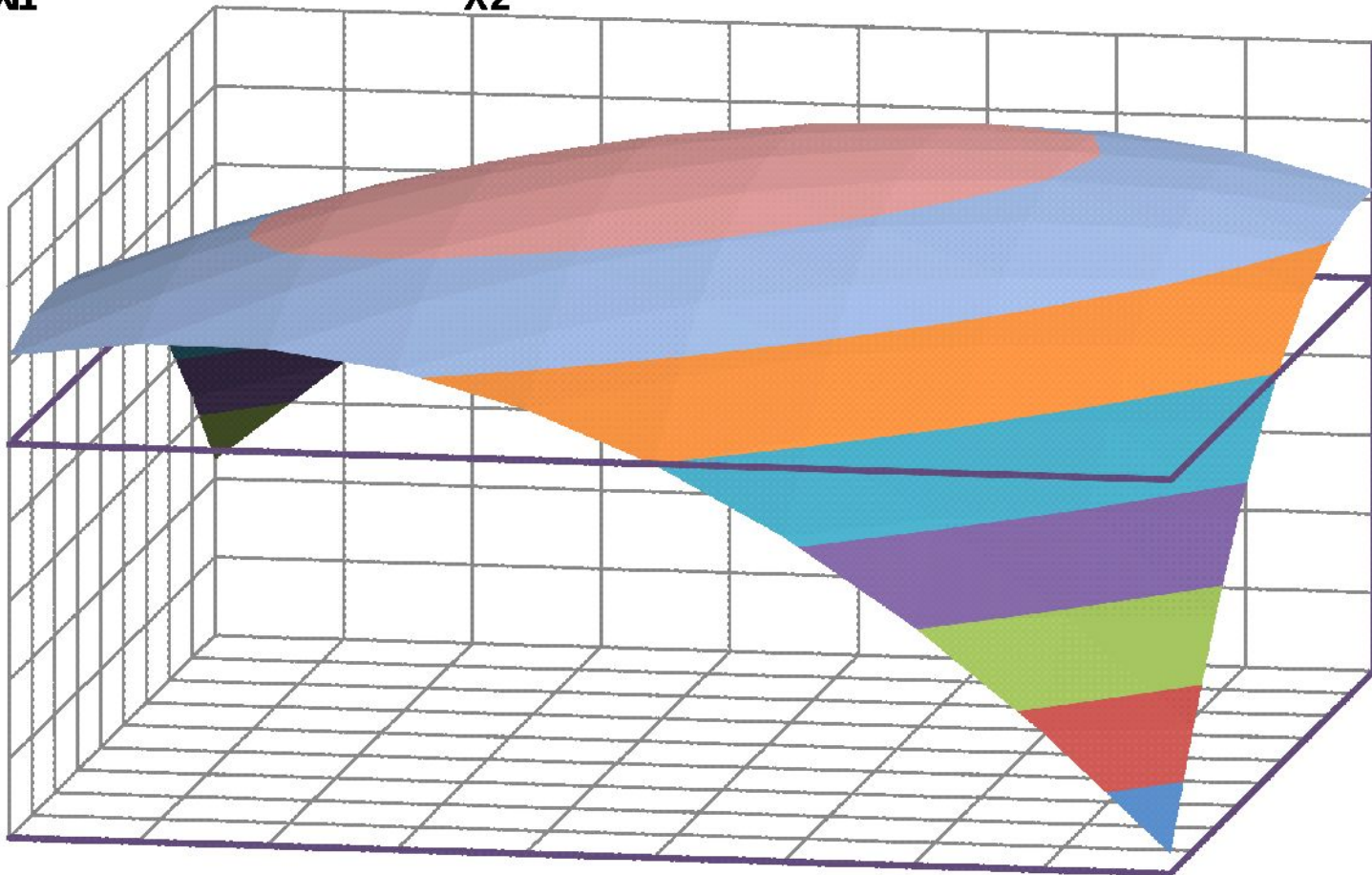


[Посмотреть](#)

$$Y = a_0 + a_1 \cdot X_1 + a_2 \cdot X_2 + a_{12} \cdot X_1 \cdot X_2 + \\ + a_{11} \cdot X_1^2 + a_{22} \cdot X_2^2$$

X1

X2



# Адекватность модели

Каждая модель должна быть проверена на верность описания реальному (исследуемому) объекту с учетом принятых допущений, т.е. проверяется адекватность модели.

Для этого проводятся проверочные испытания и делаются расчеты по модели для одинаковых условий ведения процесса и проводится их сравнение.

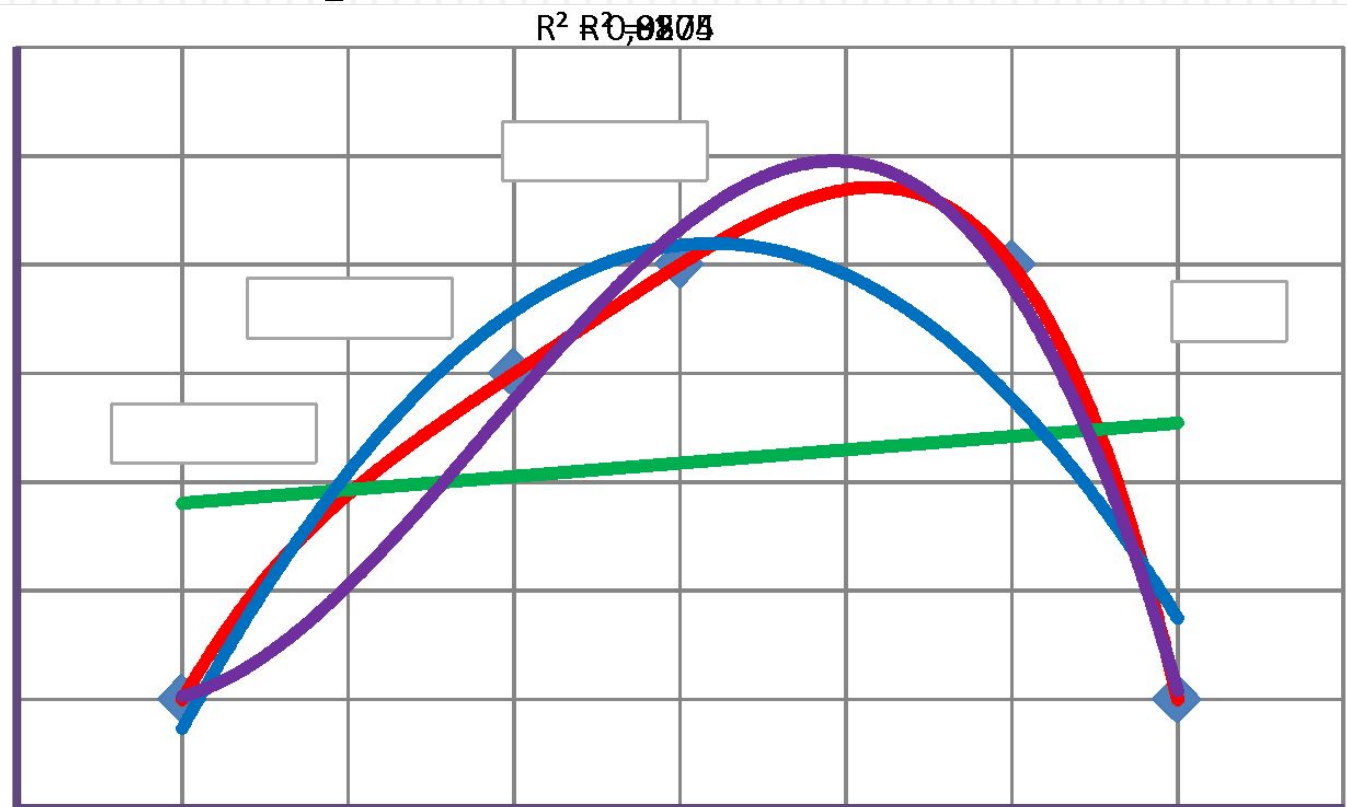
Сравнение предполагает, что разница между экспериментом и расчетом является величиной в данном случае малозначимой. Часто в качестве критериев используется проценты от средних величин измерений и проверяются на их точность.

Наряду с проверкой адекватности модели выбираются и методики эксперимента, которые обеспечат требуемую точность результатов.

# Проверка точности при аппроксимации данных

Используем критерий Пирсона ( $\chi^2$ ), который может принимать значения от 0 (полное отсутствие связей) до 1 (все расчетные и экспериментальные данные совпали).

Принимаемые значения критерия Пирсона обычно определяют из требуемой точности результатов, обычно от 0,9  $\div$  0,95 до 0,999





# Оценка адекватности статистических моделей

При выполнении статистических планов мы обычно имеем малозначимые коэффициенты в моделях, а сами значения функций ( $Y_{расч}$  и  $Y_{экс}$ ) малоотличимы друг от друга. В этом случае используем проверку через критерий Фишера, который показывает насколько лучше имеем описание экспериментальных данных через модель от точности самих экспериментов.

$$F_{расч} = \frac{S_{восп}^2}{S_{add}^2} \geq F_{табл}, \quad F_{расч} = \frac{S_{add}^2}{S_{восп}^2} \leq F_{табл}$$

В зависимости от используемой формулы оценку по критерию Фишера проводят либо насколько расчетное значение меньше критического или наоборот.