

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ  
ФЕДЕРАЦИИ

Воронежский государственный технический университет

**В.Ф. БАРАБАНОВ С.Л. ПОДВАЛЬНЫЙ**

**ИНТЕРАКТИВНЫЕ СРЕДСТВА  
МОДЕЛИРОВАНИЯ  
СЛОЖНЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ  
ПРОЦЕССОВ**

Воронеж 2000

УДК 681.51 + 681.518

Барабанов В.Ф., Подвальный С.Л. Интерактивные средства моделирования сложных технологических процессов. –Воронеж: Изд-во ВГТУ, 2000. 124 с.

В монографии приведено описание проблемно – ориентированной системы моделирования сложных технологических процессов. В качестве примера, с использованием разработанной системы проведено исследование двух динамических процессов в условиях периодического изменения входных параметров.

Издание предназначено научным сотрудникам и специалистам, занимающихся разработкой современных информационно-управляющих систем.

Ил. 42 Библиогр.: 87 назв.

Научный редактор: д-р техн. наук, проф. В.Л. Бурковский, Воронежский государственный технический университет.

Рецензенты: кафедра математического моделирования технологических систем Воронежской государственной технологической академии;  
д-р техн. наук, проф. О.Я. Кравец.

Печатается по решению редакционно-издательского совета Воронежского государственного технического университета

© Барабанов В.Ф.  
Подвальный С.Л., 2000

© Оформление. Издательство  
Воронежского государственного  
технического университета, 2000

## ВВЕДЕНИЕ

Научно-технические приемы, основанные на математических методах моделирования, повышении эффективности экспериментальных исследований, играют определяющую роль при внедрении интенсивных приемов проведения технологических процессов, основанных на всестороннем учете технологических свойств и нелинейных особенностей исследуемых объектов.

В течение последних десятилетий в сырьевой базе отечественной и мировой нефтехимии ведущая роль принадлежит низшим олефинам - этилену и пропилену. Основным источником их производства служит процесс термического разложения углеводородов- пиролиз углеводородов. Важное значение в промышленности полимерных материалов имеет процесс регенерации неподвижного слоя катализатора. Поэтому необходимо исследовать указанные процессы с целью их интенсификации.

Решение задач разработки, создания и эксплуатации современных высокоэффективных систем управления невозможно без широкого применения методов и средств моделирования с современными принципами организации диалога (интерактивных систем).

Разработка интерактивных систем - программных комплексов, обеспечивающих проведение вычислительных экспериментов в информационно-управляющих системах сложных динамических процессов, является областью активных исследований и в нашей стране, и за рубежом.

Целью работы является разработка методов моделирования, алгоритмов и программных средств, для эффективного интерактивного исследования и управления сложными распределенными процессами. Для реализации этой цели необходимо решить следующие задачи:

- разработать принципы и составить математические описания сложных технологических процессов, отражающие основные их динамические характеристики и пригодные для исследования нестационарных режимов;
- провести численное моделирование и оптимизацию технологических процессов в условиях периодического изменения

- входных параметров;
- разработать алгоритмы оптимального управления нестационарными режимами работы химических технологических процессов;
  - создать комплекс программных средств в виде интерактивной системы, осуществляющей поиск эффективных нестационарных режимов и входящую в качестве информационно-советующей подсистемы в информационно-управляющую систему технологических производств.

**Динамические системы эволюционного типа** возникают в связи с современными прикладными задачами математической физики при описании поведения сплошной среды (газ, жидкость, твердое тело). Под системами эволюционного типа, в данной работе, понимаются системы эволюционных дифференциальных уравнений в частных производных, в которых решение зависит от одной "пространственной" переменной и одной "временной". Эти системы могут быть различными по своему физическому смыслу, но имеют общий вид по математическому описанию, что позволяет единообразно формулировать краевые задачи и затем по единым принципам исследовать их [49].

Как частный случай таких задач могут рассматриваться "стационарные" задачи, то есть краевые задачи для систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

К динамическим системам эволюционного типа можно отнести систему, описывающую неустановившееся течение газа(жидкости) в трубопроводах [50]; систему, описывающую неустановившееся движение газа в трубе, в области с подвижной границей, которая является траекторией движения твердого тела (контейнера) [51]; систем, описывающую движение крови по сосудам [52]; систему, описывающую движение автомобилей по скоростной автостраде [39] и др.

В работе получены следующие результаты:

- Приведены математические описания процессов пиролиза и регенерации, представленных в виде систем дифференциальных уравнений в частных производных эволюционного типа, учитывающие значительные изменения давления смеси в указанных объектах и применимые для исследования нестационарных режимов работы.

нарных режимов.

- На основе метода Кранко-Николсона разработаны адаптивные вычислительные схемы, отличающиеся наличием "плавающей" сетки, позволяющие моделировать динамические процессы в условиях периодического изменения входных параметров с различными величинами амплитуды и частоты.
- Разработаны схема и алгоритмы эффективного управления, отличающиеся наличием последовательной интерактивной оптимизации статических и колебательных режимов, динамическими распределенными процессами в условиях вынужденных колебаний.
- Предложена методика оценки целесообразности перехода к нестационарному режиму, на основе соотношения показателей эффективности стационарных и нестационарных режимов, для интенсификации непрерывных процессов, протекающих в химических трубчатых реакторах.

Разработан программный комплекс в виде проблемно - ориентированной интерактивной системы моделирования и оптимального управления динамическими процессами в условиях вынужденных колебаний.

### **Содержание работы**

В первой главе рассмотрены требования и основные этапы разработки интерактивных систем моделирования технологических процессов; описана проблемно-ориентированная система моделирования и оптимизации непрерывных технологических процессов эволюционного типа.

Вторая глава посвящена вопросам построения математических моделей технологических процессов. Сформулированы общие требования к построению моделей, показаны этапы создания математических моделей эволюционных систем. Рассмотрены теоретические динамические модели процесса пиролиза бензина и регенерации неподвижного слоя катализатора. Освещены особенности указанных систем и проведено их исследование.

В третьей главе рассмотрены вопросы численного моделирования технологических систем эволюционного типа. Построены адаптивные (по отношению к параметрам колебаний) разностные схемы (на основе схем Кранко-Николсона), вычисли-

тельно устойчивые, имеющие высокую точность решения, и пригодные для исследования колебательных режимов. Приведены алгоритмы, и результаты моделирования процессов пиролиза и регенерации. Численное моделирование проведено как стационарных процессов, так и в условиях периодического изменения входных параметров. Рассмотрены общая схема, этапы и практическая реализация оптимизации технологических процессов.

В пятой главе проведен системный анализ влияния колебаний входных параметров на ход сложных технологических процессов, отражена классификация колебательных систем по их динамическим свойствам; приведены примеры технологических систем эволюционного типа. Рассмотрены особенности функционирования систем в условиях периодических колебаний входных параметров. Проанализированы методы изучения технологических систем и показано, что в основу исследования колебательных процессов целесообразно положить вычислительный эксперимент.

Выявлены области применения интерактивных систем в процессе проектирования и функционирования информационно-управляющих систем технологических процессов.

Проанализированы возможности применения разработанных интерактивных средств, для выбора эффективной системы управления.

# 1. РАЗРАБОТКА ИНТЕРАКТИВНЫХ СИСТЕМ

## 1.1 Требования и основные этапы разработки интерактивных систем.

К системам моделирования (СМ) технологических процессов предъявляются следующие основные требования:

- полнота и высокая скорость решения поставленных задач;
- простота взаимодействия разработчика с СМ (простота подготовки и ввода исходной информации в компьютер, наглядность отображения результатов, диагностика ошибок);
- возможность расширения круга решаемых задач.

Система моделирования, как правило, состоит из двух основных компонентов - базиса и управляющей системной части. Базис СМ представляет собой библиотеку расчетных модулей, используемых в процессе моделирования технологических процессов.

Один из важнейших элементов системного программирования - модульный принцип построения программного обеспечения [20]. Разработка программного модуля включает следующие основные компоненты [75,37]:

- выбор типа математической модели;
- построение математического описания с учетом всех сделанных допущений; уравнения при этом должны образовывать замкнутую систему; число выходных переменных должно быть равно числу независимых уравнений;
- идентификация параметров математического описания;
- выбор метода решения системы уравнений;
- разработка вычислительного алгоритма и его программная реализация;
- проверка работоспособности и адекватности разработанной математической модели.

Качество разработанного модуля оценивают по следующим показателям [76,77]:

- точность результатов вычислений;
- алгоритмическая надежность;

- простота представления исходных данных;
- полнота необходимой информации, содержащейся в результатах расчетов;
- универсальность;
- возможность коррекции модели;
- область адекватности математического описания;
- простота реализации вычислительного процесса на персональном компьютере;
- затраты машинного времени;
- используемая память.

Учитывая, что ряд приведенных требований противоречив, при построении модуля обычно идут на разумный компромисс между сложностью его структуры и точностью получаемых результатов. В составе интерактивных систем целесообразно иметь несколько библиотек модулей, в том числе и библиотеку упрощенных модулей.

Системная часть представляет собой комплекс программных средств, обеспечивающих взаимодействие с разработчиком в процессе создания или коррекции динамической модели и проведении требуемой совокупности экспериментов на ней.

При разработке систем моделирования повышенное внимание следует обращать на организацию диалогового взаимодействия человека с системой. Диалоговый режим обеспечивает существенное упрощение операций ввода-вывода информации при проведении моделирования и анализа результатов моделирования. При организации диалога необходимо выполнение следующих требований: отражение предметной области пользователя; гибкость средств для обеспечения удобства в достижении цели диалога для пользователей с разной степенью подготовки; устойчивость к ошибкам пользователей. Созданию диалоговых систем моделирования способствует появление и широкое внедрение современных технических средств интерактивного взаимодействия пользователя с ПК.

Применение систем интерактивного взаимодействия при моделировании технологических процессов вызвано следующими причинами:



- большинство решаемых задач при исследовании технологических процессов не поддается строгой формализации и могут быть решены только пользователем;
- во многих случаях формализация задачи бывает очень громоздкой и неэффективной, в то же время пользователь может решить эту задачу значительно быстрее, используя свой опыт, интуицию и зрительный аппарат;
- появляется возможность оперативно оценивать промежуточные результаты и управлять дальнейшим ходом вычислительного процесса, контролировать и корректировать данные. Интерактивный режим работы предполагает обмен сообщениями между пользователем и системой в соответствии с принятым языком диалога.

Наиболее распространенными типами диалога являются следующие:

- Диалог в режиме ответов "Да/Нет". Этот тип диалога удобен для массового пользователя, однако он затрудняет работу опытным разработчикам, так как он не позволяет обходить ряд вопросов, ответы на которые заранее известны.
- Диалог типа "меню". При таком способе пользователь всякий раз выбирает один из предложенных ПК вариантов. Этот тип диалога может использоваться для выполнения сложных работ и не требует длительного освоения системы.

При реализации высокоэффективных средств автоматизации проектирования и управления возможно и целесообразно использование комбинированных форм организации диалога.

Наряду с использованием средств диалога важнейшим атрибутом современных систем моделирования является широкое применение баз данных. База данных является информационным ядром системы, содержащим данные о модели процесса и результатах моделирования.

Эффективность реализации системы моделирования и степень удобства работы с ней во многом связаны с выбором языка программирования. Наиболее рационально применение универсальных языков программирования высокого уровня, входящих в математическое обеспечение всех современных ПК

(Фортран, Паскаль, Си и др.).

Для реализации процесса моделирования, а также осуществления взаимодействия с пользователем разрабатывается специальная системная подпрограмма – монитор моделирования, обеспечивающая реализацию того или иного управляющего алгоритма моделирования.

## 1.2. Система интерактивного моделирования и оптимизации технологических процессов

Для решения ряда практических задач, связанных с созданием эффективных информационно-управляющих автоматизированных систем управления, разработана проблемно-ориентированная интерактивная система моделирования и оптимизации, позволяющая исследовать сложные технологические процессы и выдавать рекомендации для их оптимизации. Разработка системы базировалась на идее сочетания инженерной интуиции и возможностей персонального компьютера.

Создание интерактивных систем требует, в первую очередь, построения адекватных математических моделей объектов, предназначенных для расчета его параметров в диалоговом режиме.

В данной системе в качестве математической модели технологического процесса выбрана система эволюционных дифференциальных уравнений в частных производных вида:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + A(\varphi, t, l) \frac{\partial \varphi}{\partial l} = f(\varphi, t, l) \quad \text{в } D \times D_t,$$

$$\varphi = \varphi^{ex} \quad \text{на } \partial D \times D_t,$$

$$\varphi = \varphi^o \quad \text{в } D \text{ при } t = 0.$$

где  $\varphi = \|\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_k\|$  - вектор переменных технологического процесса. Здесь предполагается, что областью определения  $D$  является множество  $\{0 \leq l \leq L\}$ ,  $\partial D$  – граница области  $D$ ,  $D_t = \{0 \leq t \leq T\}$ .

Моделирование и оптимизация технологических процессов производится с использованием приближенных методов [34,79].

Для организации интерактивного режима используются следующие методы: метод выбора из "меню", запрос на экране терминала, требующий ответа "Да", "Нет" и (или) задания параметров.

Вся интерактивная система включает в себя около 100 программных модулей, написанных на алгоритмических языках Фортран, СУБД Clipper.

Программное обеспечение не предъявляет специальных требований к операционной системе.

Важнейшими технологическими принципами построения интерактивной системы являются [80]:

- модульность программных объектов;
- единый язык программирования;
- стандартизация структуры данных;
- интерактивный режим работы;
- возможность выбора различных методов решения оптимизационных задач;
- расширяемость системы;
- обучение пользователя (на типовых примерах);
- ориентированность на широкий круг пользователей;
- обеспечение защиты данных от несанкционированного доступа;
- наличие справочной информации;
- допусковый контроль входных данных;
- наличие развитой системы диагностики ошибок;
- выдача результатов в различных формах (в виде таблиц, графиков, файлов и т. д.).

Под модулем в системе понимаются те функционально автономные элементы, из которых логически может быть построена программа,

Совокупность всех модулей образует иерархическую структуру. Модульное построение программы учитывает существование различных структурных уровней решения данного класса задач: уровня дифференциальной краевой задачи, где описывается тип уравнений, их коэффициенты и т. п.; уровня разностной краевой задачи, где описываются коэффициенты

разностных уравнений и т.п.; уровня преобразований разностных уравнений, приводящих к их решению; уровня оптимизационной задачи и т.д. Четкое разграничение различных уровней дает возможность вносить локальные изменения в один уровень без принципиальных изменений в других.

В данном комплексе программ выделена основная управляющая часть программы (ее "логический скелет"), тогда как остальные элементы программы могут свободно варьироваться от задачи к задаче. Совокупность модулей, дополняющих логический скелет, образует "библиотеку модулей", которая может расширяться в процессе эксплуатации программы.

Укрупненная схема системы интерактивного моделирования и оптимизации технологических процессов представлена на рис. 1.1.

Система интерактивного моделирования состоит из следующих основных компонент:

- динамической модели;
- интерактивного монитора;
- сервисного обеспечения диалога;
- подсистемы контроля и диагностики;
- справочной информации;
- базы данных;
- библиотеки расчетных модулей;
- библиотеки упрощенных модулей;
- модуля вывода результатов;
- блока принятия решений.

Блок принятия решений используется для оценки целесообразности перехода к нестационарному режиму.

### **1.2.1. Организация работы компонентов системы**

**Интерактивный монитор.** Особенность описываемой системы состоит в том, что задачи управления вычислительным процессом и организации интерфейса с пользователем разрешены созданием интерактивного (диалогового) монитора, написанного с помощью процедур обмена числовой, текстовой и графической информации. При этом в качестве входного языка выступает

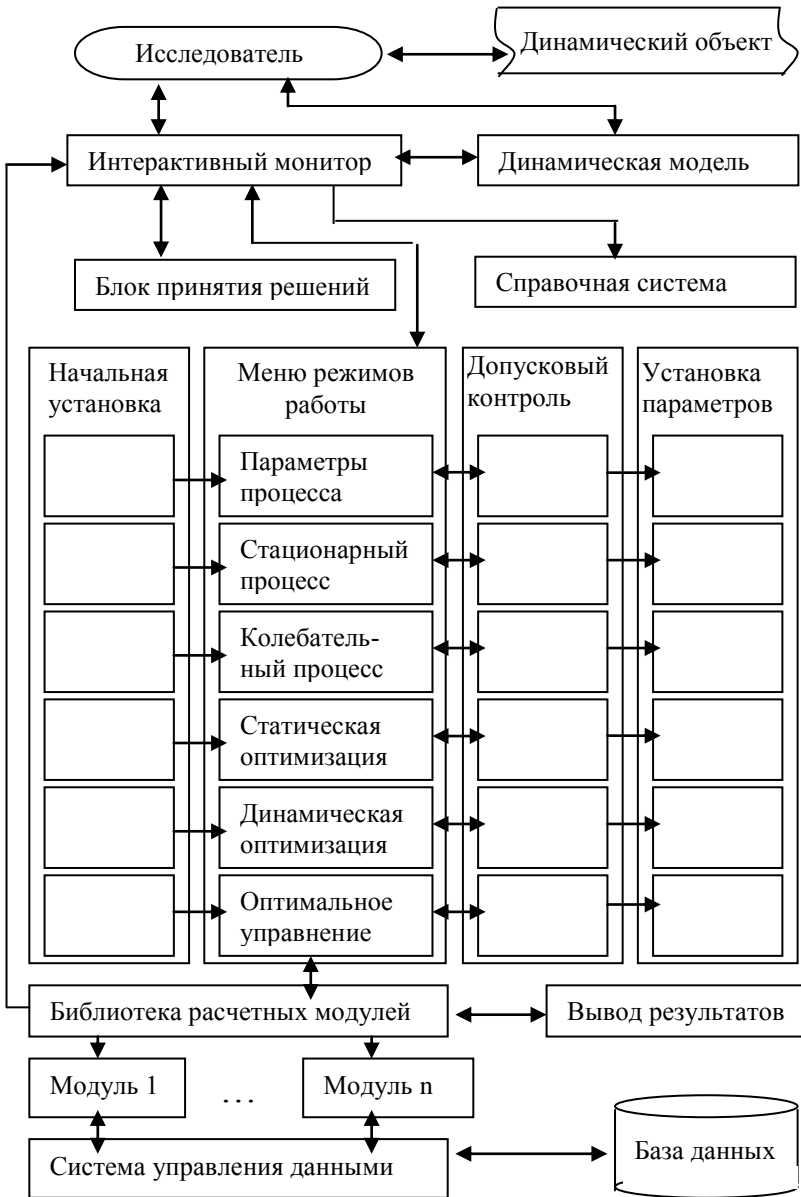


Рис. 1.1. Схема интерактивного моделирования

язык общения пользователя с системой, построенный по принципу меню, шаблонов и альтернатив (рис. 1.2).

**Подсистема контроля и диагностики.** С целью повышения надежности в систему включена подсистема контроля и диагностики, функции которой – проверить значения входных параметров на принадлежность доверительному интервалу, выдавать диагностику и позволять, в случае выхода значений параметров из заданного диапазона, произвести их повторный ввод.

**Справочная информация.** Режим справочной информации предназначен для краткого ознакомления пользователя с интерактивной системой и может быть использован в процессе работы для справок о возможностях и принципах функционирования системы.

Меню режимов справочной информации состоит из следующих компонент:

- назначение и условия применения системы;
- краткое описание работы компонентов системы;
- расшифровка условных обозначений.

Вывод справочной информации производится по кадрам.

**Библиотека расчетных модулей** представляет собой набор счетных программ для решения задач моделирования и оптимизации технологических процессов и включает в себя следующие основные компоненты, предназначенные для:

- параметрической идентификации модели;
- моделирования статического процесса;
- моделирования динамического процесса;
- оптимизации квазистатического процесса;
- оптимизации динамического процесса;
- оптимального управления;

Библиотека расчетных модулей дополнена библиотекой упрощенных модулей, полученных на основе исходных модулей.

**Данные в системе** классифицируются следующим образом: геометрические параметры; режимные параметры; параметры вывода результатов; константы для расчетов; значения переменных процесса, полученные на промежуточных и окончательных расчетах.

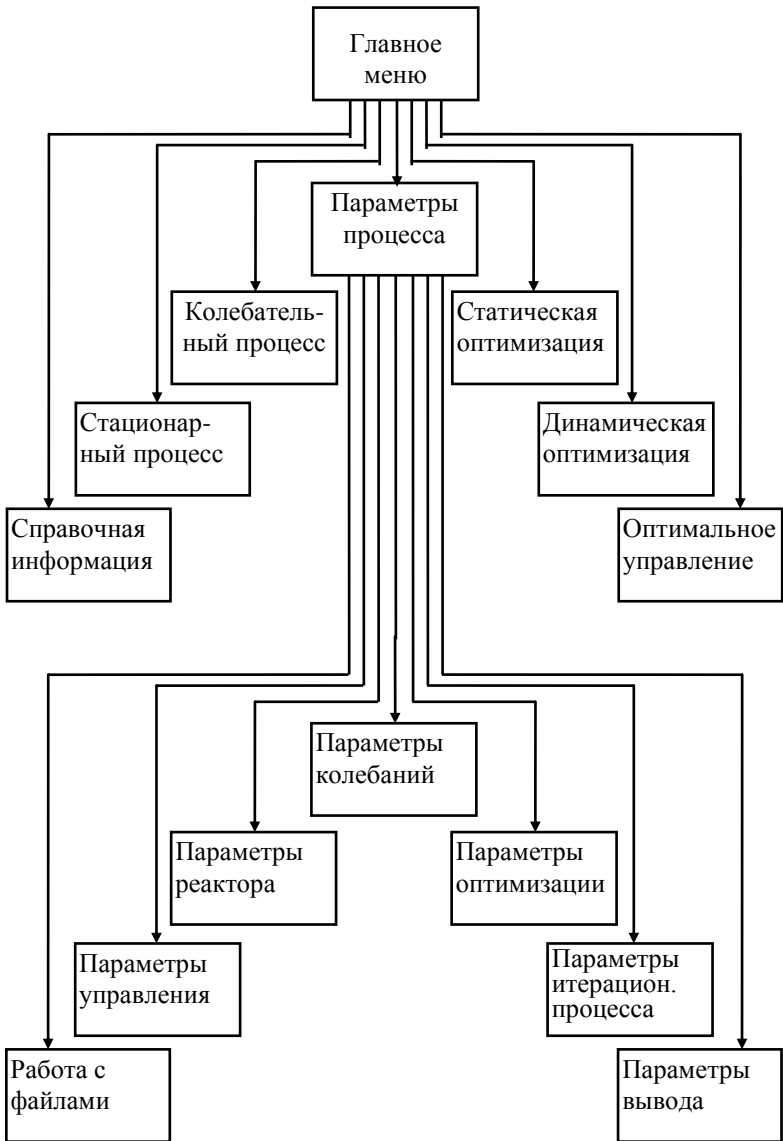


Рис.1.2. Структура подсистемы меню интерактивной системы

**База данных** системы содержит наборы значений параметров исследуемых технологических процессов и профили распределения переменных процесса во времени и в пространстве.

**Система имеет открытый характер.** Не всегда первоначально выбранная модель может рассматриваться как окончательная. В процессе решения задачи вычислитель получает много полезной информации о деталях хода процесса, которую он может по своему усмотрению анализировать с помощью компьютера (оценивать значимость различных факторов, сравнивать расчет с наблюдениями, выяснять степень чувствительности модели к различным факторам и пр.).

**Стратегия изменения системы.** Численный эксперимент и анализ результатов счета позволяет выявить слабые звенья системы, где имеются наибольшие расхождения с наблюдениями, причем становится ясно также место и направленность изменений. Это позволяет выработать стратегию модификации моделей, разностных схем, уточнения исходной информации и способов ее задания.

Выводы окончательных и промежуточных результатов возможны в цифровой и графической форме. Использование средств оперативного отображения конечных и промежуточных результатов моделирования предоставило пользователю широкие возможности по контролю за процессом моделирования. Развитие средств диалога позволило активно вмешиваться в процесс моделирования путем редактирования как результатов, так и входных данных.

Разработанная система интерактивного моделирования апробирована для исследования сложных технологических процессов- пиролиза углеводов и производства мономеров для СК [47,79].



## **2. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ЭВОЛЮЦИОННЫХ СИСТЕМ**

### **2.1. Общие подходы к построению математических моделей эволюционных систем.**

Математические эволюционные системы могут описываться различными способами [35]. Наиболее сложный и получивший широкое распространение класс эволюционных систем - системы с распределенными параметрами, описываемые эволюционными уравнениями в частных производных.

Математическое моделирование применяют, как правило, при исследовании сложных систем, когда невозможно заранее оценить последствия решений, направленных на совершенствование системы или управления ею, из-за действия взаимных или внутренних случайных факторов [36]. Математическая модель дает возможность как бы сжимать или растягивать реальное время. С ее помощью можно проводить обучение персонала управлению системой [37].

В развитии моделирования непрерывных динамических процессов можно выделить ряд этапов [8,17]:

- Математическое моделирование на основе физико-химических закономерностей и широкого использования ПК.
- Моделирование стационарных процессов.
- Моделирование динамических процессов.
- Вычислительный эксперимент.

Четвертый этап, современный, состоит в активном привлечении методов вычислительного эксперимента [39,38], заключающихся в оптимальном сочетании вычислительных процедур и натурального эксперимента.

Вычислительный эксперимент в настоящее время является основным методом реализации математического моделирования сложных динамических процессов [38].

#### **2.1.1. Общие требования к построению математических**

### **моделей динамических процессов**

Сущность машинного моделирования объекта или явления состоит в проведении на ПК эксперимента с моделью, которая представляет собой программу, описывающую поведение элементов системы при их взаимодействии друг с другом и внешней средой.

К числу требований, которые предъявляются к модели, относятся следующие [37,75]:

- Полнота модели. Модель должна быть достаточно полной, чтобы предоставить экспериментатору различные наборы характеристик;
- Гибкость модели. Модель должна быть достаточно гибкой, чтобы имела возможность воспроизводить различные ситуации;
- Блочность модели. Модель должна быть блочной, то есть допускать возможность замены, добавления и исключения некоторых частей без переделки модели;
- Точность модели. Модель должна допускать возможность выбора необходимой точности задания ее параметров. Чтобы достичь необходимой точности модели можно применить "пошаговое" уточнение модели, когда одна за другой просчитываются ее постоянно усложняемые версии.

Кроме того, желательно обеспечить возможность работы модели с банком данных системы, эффективное (по скорости и памяти) функционирование программы модели, удобство общения с нею.

Моделирование во всей полноте осуществляется с помощью интерактивной системы - программного комплекса, обеспечивающего проведение машинного эксперимента (программная реализация модели, ввод-вывод, процесс счета, диалог и т.п.). Составление модели и работа с нею являются итеративными процессами. На рис. 2.1 представлена логическая схема процесса моделирования [53,41,42].



Рис. 2.1. Схема моделирования динамического процесса

### 2.1.2. Этапы построения математических моделей динамических систем эволюционного типа

Математическая модель динамического объекта с распределенными координатами по пространственной переменной (длина, радиус, высота), в общем случае представляет собой систему уравнений

$$F\left[\frac{\partial Y}{\partial t}, \frac{\partial Y}{\partial l}, Y(l, t), X(l, t), A(l, t), t\right] = 0,$$

где  $X = \{x_i\} (i = \overline{1, m})$ ,  $Y = \{y_j\} (j = \overline{1, J})$  -

векторы входных и выходных переменных объекта. Вектор входов  $X$  можно представить состоящим из двух частей - вектора управлений  $U = \{u_k\} (k = \overline{1, K})$  и вектора возмущений  $Z = \{z_n\} (n = \overline{1, N})$ ,  $A$  - вектор параметров.

Классификация математических моделей динамических процессов приведена в работе [40].

В процессе становления математического моделирования на ПК наметились два основных пути получения математических моделей:

- на основе формальных соображений, не имеющих связи с типом объекта, его конструкцией, механизмом протекающих реакций;
- на основе теоретического анализа физико-химических процессов, протекающих в объекте.

Первый подход был успешно применен для управления некоторыми динамическими системами [42]. Однако для анализа физико-химических технологических процессов, масштабного перехода от лабораторных исследований к промышленным условиям, этот метод не оказался плодотворным.

При выводе уравнений теоретической математической модели учитывают: гидродинамические режимы перемещения

веществ; скорости химических превращений, диффузии, передачи тепла и т.д.; уравнения материального и энергетического (теплого) балансов; уравнения фазовых превращений и др. В функции  $F$  входят (в явной или косвенной форме) основные конструктивные размеры аппарата (поверхности теплообмена, диаметры и длины труб реакторов и т.п.). Чем детальнее и полнее теоретические (неформальные) математические модели, тем сложнее структура  $F$  и выше размерность вектора  $A$ , компонентами которого являются параметры уравнений кинетики (константы скоростей, энергии активации, коэффициенты диффузии и т.п.) и характеристики веществ (теплоемкости, плотности и т.д.). Это позволяет использовать теоретические модели для оптимального конструирования аппаратов, оптимизации режимов их работы, оптимального управления и т.п.

Методика вывода уравнений теоретических математических моделей динамических процессов рассмотрена в работах [43,44] и др.

При построении математических моделей применяют иерархический подход, заключающийся в разложении сложного процесса на более простые составляющие для их отдельного изучения и установления причинных связей между ними [1].

Иерархический подход дополняется эволюционным, который обусловлен необходимостью перехода на всех уровнях к динамическим задачам. Динамика изучает закономерности развития реакционной системы во времени. Основные динамические параметры характеризуют скорость изменения процесса и его инерционность. Суть эволюционного подхода заключается в выявлении иерархии характерных времен, определении условия разделения быстрых, умеренных и медленных стадий и условий квазистационарности. Возможность расщепления обусловлена в ряде случаев четким различием взаимодействий между уровнями, а также внутри уровня между газодинамическими, массообменными, теплообменными и физико-химическими составляющими общего процесса.

Детерминированные математические модели отражают закономерности процессов, протекающих в динамических системах. Детерминированные модели, построенные с использованием

теоретического подхода, имеют ряд существенных преимуществ: их можно разрабатывать даже при отсутствии действующего объекта, как это часто бывает при проектировании; они качественно более правильно характеризуют процессы, протекающие в объекте, даже при наличии недостаточно точных в количественном отношении параметров модели; пригодны для обобщений, связанных с изучением общих свойств объектов определенного класса и для прогнозирования поведения объекта [45]. Наиболее полное представление о поведении объекта дают динамические модели.

Динамические математические модели описывают как стационарные, так и переходные, неустановившиеся режимы функционирования объектов. Причем статический режим можно рассматривать как результат завершения переходного процесса.

По структуре математические модели динамических объектов, как правило, нелинейны. Структура и степень детализации математического описания зависит от целей исследования, объема информации, положенного в основу модели, и других факторов. Ввиду сложности динамических процессов при разработке их математических моделей обычно вводят ряд упрощающих допущений. Например, для описания структуры потока в аппарате часто используют два предельных режима: режим идеального вытеснения и полного смешения.

Типовая процедура поэтапного построения полной математической модели динамического процесса эволюционного типа представлена на рис. 2.2 [40,42].

При масштабировании динамической модели применяются линейные замены переменных вида

$$X=DY$$

где  $\{x_j\}$  - исходные переменные,  $\{y_j\}$  - преобразованные,  $D$  - диагональная матрица, где в качестве диагональных элементов используются характерные значения модулей соответствующих переменных.

Если известен вероятностный диапазон значений переменных  $a_j \leq x_j \leq b_j$ , тогда новая переменная вводится по формуле



Рис. 2.2. Этапы построения полной математической модели динамического процесса

$$y_j = \frac{2x_j}{b_j - a_j} - \frac{a_j + b_j}{b_j - a_j}$$

или в матричном виде

$$X=DY+C$$

где D - диагональная матрица, чей j-й диагональный элемент равен  $\frac{1}{2}(b_j - a_j)$ ; C - вектор, составленный из полусумм  $\frac{1}{2}(b_j + a_j)$ .

Построенную математическую модель проверяют на адекватность экспериментальным данным и, в случае необходимости, корректируют ее параметры. Затем разрабатывают алгоритм решения уравнений и формируют модуль в виде соответствующей программы для ПК.

## **2.2. Полная динамическая модель процесса пиролиза углеводородов**

Наибольшее количество пластических масс получают на основе низших олефинов [46]. Основным способом получения олефинов является пиролиз газообразного и жидкого сырья в трубчатых реакторах.

Пиролиз углеводородов - сложный процесс термических превращений, протекающих при высокой температуре. Пиролиз на олефины осуществляют при 750 °С и выше, время пребывания углеводородов в реакционной зоне составляет менее 1 с., давления 100-150 кПа.

Основным элементом трубчатой пиролизной печи являются обогреваемые змеевики, где в присутствии водяного пара протекают реакции термического разложения углеводородов. Режимными параметрами трубчатой пиролизной печи, определяющими термические превращения углеводородов в процессе, а следовательно, и состав получаемых продуктов, являются следующие: температурное поле (профиль) реакционной смеси по длине змеевика, время пребывания смеси в зоне реакции (время контакта), соотношение расходов сырья и водяного пара в реактор (парциальное давление углеводородов), поле давления реакционной



смеси по длине змеевика, состав исходного сырья и степень закоксованности змеевика.

В научной литературе недостаточно сведений о динамике процесса пиролиза бензина, что значительно затрудняет исследование различных систем управления печью пиролиза с целью выбора наиболее эффективного из них [47].

Отметим, что всестороннее экспериментальное изучение динамических свойств такого сложного нестационарного объекта с распределенными параметрами, как печь пиролиза бензина, в условиях действующего производства не представляется возможным. Это связано с необходимостью проведения многочисленных экспериментов, вызывающих нарушения технологических режимов работы печи пиролиза и, как следствие, приводящих к значительным экономическим потерям. Поэтому одним из важнейших способов изучения динамики объекта в нашем случае является метод математического моделирования [48,49].

При построении математической модели динамики процесса пиролиза приняты следующие допущения:

- вследствие высокой турбулентности потока реакционной смеси ( $Re \approx 0,5 \cdot 10^6$ ) примем, что все параметры потока (температура, давление, состав) в любом поперечном сечении змеевика постоянны;
- учитывая предыдущий пункт и в силу отношения длины пирозмеевика к диаметру ( $L \gg d$ ), структура его материальных и тепловых потоков соответствует реактору идеального вытеснения с распределенными параметрами;
- площади поперечных сечений реактора для реакционной смеси постоянны по всей длине реактора;
- теплофизические свойства потоков и стенок реактора постоянны;
- не учитываются тепловые потоки в окружающую среду.

Уравнения математической модели основаны на законах сохранения массы, энергии и количества движения, которые приводят к нестационарным уравнениям баланса [43,44,50]:

$$\frac{\partial C_{\kappa}}{\partial t} + V \frac{\partial C_{\kappa}}{\partial l} = \frac{1}{\rho} W_{\kappa}, \kappa = \overline{1,6}; \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + V \frac{\partial T}{\partial l} = \frac{2K_T}{r\rho C_p} (T_c - T) - \frac{1}{\rho} C_p \sum_{j=1}^6 \Delta H_j W_j; \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + V \frac{\partial V}{\partial l} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial l} - \xi \frac{V^2}{4r}; \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + V \frac{\partial \rho}{\partial l} = -\rho \frac{\partial V}{\partial l}, \quad (2.4)$$

где  $C_{\kappa}$ ,  $W_{\kappa}$  - массовые концентрации и скорости превращения  $\kappa$ -го компонента в реакционной смеси;  $T$ ,  $V$ ,  $P$ ,  $\rho$ ,  $C_p$  - температура, скорость потока, давление, плотность и удельная теплоемкость смеси;  $\Delta H$  - тепловой эффект химической реакции;  $K_T$  - коэффициент теплопередачи;  $T_c$  - температура стенки змеевика;  $r$  - внутренний радиус трубчатого змеевика;  $\xi$  - коэффициент трения;  $t$ ,  $l$  - временная и пространственная (в направлении потока) координаты.

Здесь (2.1) - уравнение материального баланса  $\kappa$ -го компонента смеси, (2.2) - уравнение энергетического баланса реакционной смеси, (2.3) - уравнение импульсного баланса смеси, (2.4) - уравнение неразрывности.

В работе используется схема кинетических превращений, описывающая химический процесс разложения бензина, построенный по методу групповых компонентов [50]. Она состоит из 13 реакций между 6 компонентами:

$$\begin{aligned} W_1 &= -(K_1 + K_2 + K_3 + K_4)C_1; \\ W_2 &= K_1C_1 - (K_8 + K_{11})C_2 + K_5C_3 + K_7C_4; \\ W_3 &= K_2C_1 - (K_5 + K_9 + K_{12})C_3 + K_6C_4; \\ W_4 &= K_3C_1 - (K_6 + K_7 + K_{10} + K_{13})C_4; \\ W_5 &= K_4C_1 - K_{11}C_2 + K_{12}C_3 + K_{13}C_4; \\ W_6 &= K_8C_2 + K_9C_3 + K_{10}C_4; \end{aligned} \quad (2.5)$$

Здесь  $C_k, W_k$  ( $k = \overline{1,6}$ ) - массовые концентрации и скорости превращения бензина, этилена, пропилена, фракции С4, суммы газообразных продуктов (СГП) и суммы жидких продуктов (СЖП) соответственно.

Константы скоростей химических реакций определяются по закону Аррениуса:

$$K_i = K_{0i} \exp(-E_i/RT), \quad (2.6)$$

где  $K_{0i}, E_i$  - предэкспоненциальный множитель и энергия активации для  $i$ -й реакции;  $T$  - температура;  $R$  - универсальная газовая постоянная.

Уравнение состояния пиромеси примет вид:

$$P = \rho RT \sum_{k=1}^6 C_k. \quad (2.7)$$

Полученная система дифференциальных уравнений в частных производных (2.1)-(2.4) решается с краевыми условиями:

начальными при  $t=0$  и  $0 \leq l \leq L$ :

$$\begin{aligned} C_k(l,0) &= C_k^0(l), \quad k = \overline{1,6}; T(l,0) = T^0(l); \\ V(l,0) &= V^0(l); \quad \rho(l,0) = \rho^0(l); \end{aligned} \quad (2.8)$$

и граничными при  $t > 0$  и  $l=0$

$$\begin{aligned} C_k(0,t) &= C_k^{bx}(t), \quad k = \overline{1,6}; T(0,t) = T^{ex}(t); \\ V(0,t) &= V^{ex}(t); \quad \rho(0,t) = \rho^{ex}(t). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Исследования оптимальных решений задачи управления тепловым режимом по длине змеевиков печей пиролиза показали, что для реальных объектов оптимум определяется ограничениями на процесс теплопередачи от обогревающих горелок к потоку реакционной смеси [50]. Показано, что оптимальный режим пиролиза по длине змеевика достигается в том случае, если параметры, минимизирующие подачу тепла к его конечному участку, устанавливаются на максимально допустимом ограничении. Отсюда для определения температуры стенки змеевика может быть использовано выражение

$$T_c(l) = T_c^{bx} + (T_c^{6bx} - T_c^{6x}) \cdot \left(\frac{l}{L}\right)^\alpha. \quad (2.10)$$

Здесь  $T_c^{6x}, T_c^{6bx}$  - температура стенки змеевика на входе и выходе,  $\alpha$  - параметр наклона температурного профиля.

Из опыта эксплуатации пиролизных установок известно, что кокс откладывается по длине трубы (в последней трети змеевика) с увеличением толщины слоя к выходу [50]. Отложение кокса вызывает изменение диаметра пирозмеевика:

$$d(l) = \begin{cases} d_0, & 0 < l < \frac{2}{3}L \\ d_0 - \bar{\alpha} \left( l - \frac{2}{3}L \right), & \frac{2}{3}L \leq l \leq L, \end{cases} \quad (2.11)$$

где  $\bar{\alpha}$  - коэффициент прироста толщины слоя кокса по длине пирозмеевика, выбираемый в различные моменты времени из условия  $0 \leq \bar{\alpha} \leq 0,0021$ ;  $d_0$  - первоначальный внутренний диаметр змеевика. Диаметр  $d$  непосредственно входит в соотношения для расчета коэффициента теплопередачи  $K$  и площади поперечного сечения  $S$  пирозмеевика.

Динамическая модель (2.1) - (2.11) пиролиза бензина дополняется рядом алгебраических соотношений для вычисления физико-химических параметров [50]. Начальные условия определяются в результате решения системы уравнений модели статики, получаемой из системы (2.1) - (2.4) приравниванием к нулю всех частных производных по времени.

В качестве основного показателя эффективности процесса выбрана величина, отражающая доход, получаемый от переработки единицы получаемого сырья в товарные продукты [51]

$$F = \sum_{i=1}^6 \int_0^{T_p} A_i m_i C_i(L, t) dt / \sum_{i=1}^6 \int_0^{T_p} m_i C_i(L, t) dt, \quad (2.12)$$

где  $A_i$  - заданные числа;  $m_i$  - молекулярная масса химических

продуктов,  $T_p$  - заданный интервал времени.

В случае сложных реакций большое практическое значение имеет изменение селективности. При нестационарном протекании нескольких параллельных реакций со скоростями  $W_i$  и ( $i = \overline{1, I}$ )  $W_j$ , ( $j = \overline{1, J}$ ) из которых первая группа полезные реакции (в процессе пиролиза бензина - этилен, пропилен, фракция С4), а вторая - побочные, селективность определяется выражением

$$S = \frac{\sum_{i=1}^I \int_0^{T_p} W_i(L, t) dt}{\sum_{i=1}^I \int_0^{T_p} W_i(L, t) dt + \sum_{j=1}^J \int_0^{T_p} W_j(L, t) dt}.$$

Учитывая, что реакционная среда сжимаемая, то в процессе движения по пирозмеевику изменяются скорости и плотности пиросмеси. В установившихся режимах эти колебания взаимно компенсируют друг друга, так что при постоянной площади поперечного сечения потока выполняется соотношение  $G = \rho V S$ , где  $G$  - массовый расход паро- сырьевой смеси. Учитывая равенство  $\rho V = G/S$ , систему (2.1)-(2.4) можно преобразовать к виду [44,52]

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + \frac{G}{\rho S} \frac{\partial C_k}{\partial l} = \frac{1}{\rho} W_k, K = \overline{1, 6}, \quad (2.13)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{G}{\rho S} \frac{\partial T}{\partial l} = \frac{2K_T}{r\rho C_p} (T_c - T) - \frac{1}{\rho C_p} \sum_{j=1}^6 \Delta H_j W_j + \frac{1}{\rho C_p} \left( \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{G}{\rho S} \frac{\partial P}{\partial l} \right), \quad (2.14)$$

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -S \frac{\partial P}{\partial l} - \xi \frac{G^2}{4\rho r S}, \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{S} \frac{\partial G}{\partial l} = 0. \quad (2.16)$$

Последний член в уравнении (2.14) добавлен для учета значительного изменения давления смеси в процессе. Соответственно в граничных и начальных условиях произойдет замена скорости потока  $V$  на расход сырья  $G$ .

При колебательном течении скорость потока ( а следовательно и число Рейнольдса) со временем изменяется. При практических расчетах обычно используется максимальное значение числа Рейнольдса или его среднего значения за цикл. Среднее за цикл значение числа Рейнольдса вычисляется по формуле [53,54]:

$$R_e = \frac{V_{cp} d}{\nu},$$

где  $d$  -диаметр трубы;  $\nu$ -кинематическая вязкость;  $V_{cp}$  -средняя скорость потока.

Для вычисления коэффициента сопротивления в гидравлике широко используется формула Блазиуса

$$\xi = \frac{0.3164}{R_e^{0.25}},$$

применяемость которой ограничена значениями  $R_e < 10^5$ .

Закон сопротивления при ламинарном движении примет вид

$$\xi = \frac{64}{R_e}.$$

При высоких числах Рейнольдса ( $R_e > 10^5$ ) целесообразно применять формулу Никурадзе:

$$\xi = 0,0032 + \frac{0,221}{R_e^{0,237}}. \quad (2.18)$$

Для колебательных течений вязкой жидкости вводятся и применяются добавочные безразмерные параметры [55,56,57]:

Число Стокса определяется как  $S = d^2(2\pi f / \nu)$ , где  $f$  - частота колебаний. Это число требуется вводить для приведения частоты к безразмерному виду, и его можно трактовать как отношение связанной с частотой силы инерции к силе вязкого трения.

Число Кармана характеризует отношение силы, определяемой градиентом давления, к силе трения и выражается формулой

$$K = \frac{d^3}{\rho V^2} \left| - \frac{dP}{dl} \right|, \quad (2.19)$$

где  $\rho$  - плотность, а  $\left| - \frac{dP}{dl} \right|$  - максимальная величина градиента давления.

Течение жидкости (или газа) в трубе постоянного диаметра однозначно определяется значением  $K$  для стационарного течения и значениями  $K$  и  $S$  для колебательного движения.

Проверка адекватности модели для объекта с распределенными параметрами проводится на основе следующего подхода [44]. В начале проверяется адекватность математической модели в стационарном режиме; в качестве корректирующих параметров используются предэкспоненциальные множители  $K_{oi}$ ; энергии активации  $E_i$  ( $i = 1, 6$ ) в выражениях констант скоростей химических реакций, коэффициент теплопередачи  $K_T$ . Затем проводится проверка адекватности математической модели в динамическом режиме, определяются переходные функции и сравниваются с экспериментально полученными данными.

В качестве параметров адекватности используются следующие переменные: температура  $T(L, t)$ , давление  $P(L, t)$ , концентрации целевых продуктов ( $C_2(L, t)$ ,  $C_3(L, t)$ ,  $C_4(L, t)$ ) на выходе змеевика, Показатель адекватности выбран в виде

$$\phi = \int_0^{LT} \int_0^I \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^r \left| \varphi_{ij}(l, t) - \varphi^{\circ}_{ij}(l, t) \right|^2 a_{ij} dl dt,$$

где  $I$  - количество выходных переменных (параметров адекватности)  $r$  - количество различных экспериментов;

$\varphi_{ij}(l, t), \varphi^{\circ}_{ij}(l, t)$  - вычисленные по модели и измеренные на объекте параметры адекватности при одинаковых граничных условиях;  $a_{ij}$  - весовые множители.

Максимальная погрешность вычисления статических и динамических характеристик на модели не превышает погрешности хроматографического анализа (~4 % отн.).

### **2.3. Математическая модель процесса регенерации неподвижного слоя катализатора**

В химической промышленности широко распространены процессы, которые осуществляются в реакторах с неподвижным слоем катализатора. Такие процессы сопровождаются побочными реакциями, приводящими к закоксовыванию катализаторов. Отлагающийся кокс существенно меняет свойства катализатора, снижает его активность и селективность. В производственных условиях это вызывает необходимость периодического отключения реакторов для регенерации катализатора, то есть удаления с него кокса [58].

В целом коксоотложение значительно усложняет промышленный процесс, снижает продуктивность единицы объема катализатора резко увеличивает эксплуатационные расходы и себестоимость продукта. Отсюда вытекает, что весьма актуальными задачами являются поиск путей снижения закоксованности и оптимальных режимов регенерации катализаторов.

Регенерация катализатора заключается в выжиге кокса подачей воздуха с водяным паром. В основе регенерации лежат химические реакции кокса с кислородом, приводящие к удалению кокса путем образования газообразных веществ.

Для составления математической модели процесса регенерации неподвижного слоя катализатора делались следующие предположения [59,60]:

- поток кислородсодержащего газа через слой катализатора является потоком идеального вытеснения;
- температура по поперечному сечению реактора и зерна катализатора не меняется;
- массой газа, находящейся в порах зерна катализатора, можно пренебречь по сравнению с массой катализатора;
- можно пренебречь изменением массы кислородсодержащего газа в ходе процесса.

При этих предположениях математическую модель рассматриваемого процесса можно представить системой уравнений материального (по кислороду и коксу) и теплового балансов:



$$\frac{\partial M}{\partial t} + U \frac{\partial M}{\partial l} = -W / \rho_1, \quad (2.20)$$

$$\frac{\partial G}{\partial t} = -W / \rho_2 a_2, \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + U^* \frac{\partial T}{\partial l} = QW / \rho_1 C - \frac{\lambda S_0 (T - T_n)}{\rho_1 C S}. \quad (2.22)$$

Здесь введены следующие обозначения:

$$\rho_1 = \varepsilon \rho_1^0; \rho_2 = (1 - \varepsilon) \rho_2^0; C = C_1 + \rho_2 c_2 / \rho_1;$$

$$U = V_0 / \rho_1 S; U^* = C_1 U / C;$$

где  $V_0$  - масса газа, поступающего в реактор за 1с.;

$\rho_1^0$  - плотность газа;

$C_1$  - удельная теплоемкость газа;

$C_2$  - теплоемкость катализатора;

$\varepsilon$  - доля свободного объема в слое катализатора;

$S$  - площадь поперечного сечения слоя;

$S_0$  - площадь боковой поверхности слоя на единицу его длины;

$Q$  - тепловой эффект реакции;

$W$  - скорость реакции, измеренная по кислороду и отнесенная к единице объема реактора;

$T_n$  - температура внешней среды;

$\lambda$  - коэффициент теплопередачи через стенку;

$a$  - константа, характеризующая соотношение скоростей реакции по кислороду и коксу;

$M$  - содержание кислорода в газе;

$G$  - содержание кокса в катализаторе;

$T$  - температура процесса;

$U$  - средняя массовая скорость потока в поровом пространстве катализатора;

$t, l$  - временная и пространственная (в направлении потока) координаты.

Скорость реакции, измеренная по кислороду, определяется в виде

$$W = K(T)M \left( \frac{G}{G_0} \right)^r, \quad (2.23)$$

где  $K(T)$  - константа скорости реакции окисления кокса;

$G_0$  - начальная концентрация кокса;

$r$  - константа, характеризующая область протекания реакции:

$r=0$  соответствует кинетической и внешнедиффузионной области;

$r=1$  соответствует внутри диффузионной области.

Константа скорости реакции представляется в виде [58]:

$$K(T) = a_1 \exp \left\{ -\frac{E}{RT} (1 - \alpha T) \right\}, \quad (2.24)$$

где  $a$ ,  $\alpha$  - константы, присущие конкретным условиям регенерации;

$E$  - энергия активации;

$R$  - универсальная газовая постоянная.

для системы (2.20)-(2.24) задаются краевые условия:

начальные при:  $t=0, 0 \leq l < L$ :

$$M(l,0)=0, G(l,0)=G_0(l), T(l,0) = T_0(l) \quad (2.25)$$

и граничные при  $t \geq 0$  и  $l=0$ :

$$M(0,t) = M^{bx}(t), \quad T(0,t) = T^{bx}(t) \quad (2.26)$$

Для адиабатического реактора  $\lambda = 0$ , то есть отсутствует теплообмен с окружающей средой. Примем  $r=1, \alpha=0$ . Обозначим

$$K_1 = -\frac{1}{\rho_1}; K_2 = -\frac{1}{\rho_2 \alpha_2}; K_3 = \frac{Q}{\rho_1 C}.$$

В этом случае система уравнений (2.20)-(2.24) переписется в виде

$$\frac{\partial M}{\partial t} + U \frac{\partial M}{\partial l} = K_1 W, \quad (2.27)$$

$$\frac{\partial G}{\partial t} = K_2 W, \quad (2.28)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + U^* \frac{\partial T}{\partial l} = K_3 W. \quad (2.29)$$

Начальные условия (2.25) по кислороду  $M$  имеют разрыв. С целью их сглаживания предполагается, что в процессе регенерации допускается квазистационарное изменение концентрации кислорода, то есть когда

$$\left| \frac{\partial M}{\partial T} \right| \ll u \frac{\partial M}{\partial l}.$$

В этом случае уравнение (2.27) можно переписать в виде

$$u \frac{\partial M}{\partial l} = K_1 W.$$

И для получения гладких начальных условий решается следующая задача:

$$\frac{\partial M}{\partial l} = \frac{K_1 W}{u}. \quad (2.30)$$

$$M(0) = M_0. \quad (2.31)$$

#### **2.4. Особенности моделирования динамических процессов в условиях периодического изменения входных параметров**

При моделировании динамических процессов в условиях периодического изменения входных параметров (например, процессы протекающие в трубчатых химических реакторах), необходимо учитывать следующие особенности [60].

- Переходные процессы заканчиваются не мгновенно, а имеют некоторый период релаксации.

- Установившийся процесс может быть квазистатическим, периодическим или скользящим.

Время приближения состояния динамического процесса к стационарному  $R_c$ , или, иначе, время переходного режима (время релаксации), следует оценивать в сравнении с длительностью самого процесса  $R_n$ , то есть со временем реакции.

Для процессов, протекающих при изменяющихся параметрах газовой фазы, целесообразно ввести понятие масштаба времени изменения состояния газовой фазы  $R_r$ . При периодическом изменении состояния газовой фазы  $R_r$  - длительность периода. В подавляющем большинстве случаев  $R_n \gg R_r$ . Для быстропротекающих процессов имеет место соотношение  $R_n \approx R_c$  (например, процесс пиролиза углеводородов).

Динамический процесс считается периодическим установившимся, если можно выбрать такой период  $T_p$ , для которого выполняется равенство [3]

$$\frac{1}{T_p} \int_t^{t+T_p} \varphi(l, t) dt = \bar{\varphi}(l).$$

Среди периодических установившихся режимов можно выделить три предельных класса. Первый класс включает в себя режимы, в которых каждый из периодов  $T_p$  значительно превышает время переходных процессов в объекте. При этом каждое из таких состояний объекта предполагается устойчивым. В этом случае можно пренебречь динамикой объекта и считать, что при изменении режимных переменных переменные состояния изменяются в соответствии со статическими характеристиками. Такие режимы называются квазистатическими. Второй класс - в которых период колебаний порядка времени переходных процессов в объекте. Третий класс образуют скользящие режимы, в которых все или некоторые из режимных переменных изменяются с такой высокой частотой, что за счет инерционности объекта переменные состояния остаются практически неизменными и их значения зависят лишь от осредненного влияния изменения режимных переменных.

### 3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ ЭВОЛЮЦИОННОГО ТИПА

#### 3.1. Общая схема численного моделирования динамических систем

В канонической форме динамические системы эволюционного типа представляются в виде [62]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \frac{\partial \varphi}{\partial l} = f(u, \varphi) \quad \text{в } D \times D_t, \quad (3.1)$$

$$\varphi = \varphi^{bx} \quad \text{на } \partial D \times D_t, \quad (3.2)$$

$$\varphi = \varphi_0 \quad \text{в } D \text{ при } t = 0, \quad (3.3)$$

где  $\varphi = \|\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_k\|$  - вектор переменных динамического процесса. Здесь предполагается, что областью определения  $D$  является множество  $\{0 \leq l \leq L\}$ ,  $\partial D$  - граница области  $D$ ,  $D_t = \{0 \leq t \leq T\}$ .

Разностная аппроксимация позволяет редуцировать краевую задачу для системы дифференциальных уравнений к соответствующей ей системе разностных уравнений. Для этого на плоскости  $(l, t)$  вводится сетка  $D_{ht} = D_h \times D_\tau$

$$D_h = \{l_i = ih, i = \overline{0, I}\}$$

$$D_\tau = \{t_j = j\tau, j = \overline{0, 1, 2, \dots}\}$$

шагами  $h$  (по  $l$ ) и  $\tau$  (по  $t$ ).

Положим  $u > 0$  ( $u = \text{const}$ ). К числу наиболее употребительных разностных схем относятся следующие [29,30]:

$$\frac{\varphi_i^{j+1} - \varphi_i^j}{\tau} + u \frac{\varphi_{i+1}^{j+1} - \varphi_{i-1}^{j+1}}{2h} = f^{j+1}; \quad (3.4)$$

$$\frac{\varphi_i^{j+1} - \varphi_i^j}{\tau} + u \frac{\varphi_{i+1}^{j+1/2} - \varphi_{i-1}^{j+1/2}}{h} = f^{j+1/2}; \quad (3.5)$$

$$\frac{\varphi_i^{j+1} - \varphi_i^j}{\tau} + u \frac{\varphi_{i+1}^{j+1/2} - \varphi_{i-1}^{j+1/2}}{2h} = f^{j+1/2}; \quad (3.6)$$

$$\varphi_i^{j+1/2} = \frac{1}{2} (\varphi_i^{j+1} + \varphi_i^j).$$

Схема (3.4) является схемой первого порядка аппроксимации по  $\tau$  и второго по  $h$ , абсолютно счетно устойчива. Схема (3.5) - так называемая схема "бегущего счета". Эта схема второго порядка аппроксимации по  $\tau$  и первого по  $h$ , абсолютно устойчива. Схема (3.6) - схема Кранко-Николсона. Имеет второй порядок аппроксимации по  $\tau$ ,  $h$ , абсолютно устойчива.

Выше всюду предполагалось, что  $u$  постоянна и положительна. Однако в нашем случае  $u=u(1, t)$ . Уже самый простой анализ показывает, что в том случае даже при использовании неявных разностных схем возможно нарушение счетной устойчивости. При использовании разностных схем Кранко-Николсона и "бегущего счета" в данной работе и берется на промежуточном слое

$$u_i^{j+1/2} = (u_i^{j+1} + u_i^j) / 2.$$

Численное моделирование системы (3.1) - (3.3) проводится на основе схем Кранко-Николсона и "бегущего счета". Значение любой сеточной функции на верхнем  $(j+1)$ -м временном слое определяется с помощью итерационного процесса [31]:

$$\varphi_i^{j+1} = \lim_{m \rightarrow \infty} \varphi_i^{(m)},$$

где  $m$  - номер итерации. В качестве начальной итерации берется

значение функции с предыдущего слоя  $\varphi_i^{(0)} = \varphi_i^j$

Итерационный процесс прекращается либо по достижении заданного числа итераций, либо при выполнении условия

$$\max |\varphi_i^{(m+1)} - \varphi_i^{(m)}| < \varepsilon,$$

где  $\varepsilon$  - малая заданная величина.

Изучение динамических свойств объекта, математическая модель которого представлена в виде системы (3.1) - (3.3), проводится в интерактивном режиме (см. рис. 3.1). С пульта терминала ПК, в ответ на запрос программы, задаются режимные параметры (блок 1) и параметры управления выводом результатов (блок 2) моделирования динамического процесса. Ввод параметров программно контролируется и, в случае задания недопустимых значений, производится их повторный ввод. Блоком 3 вводятся граничные условия  $\varphi^{6x}$ .

Начальные условия модели вводятся блоком 4 из файла или получаются в результате решения статической модели, образуемой из исходной динамической системы приравниванием всех частных производных по времени к нулю (блок 5). В блоке 6 задаются номера  $K$  каналов изменения входных переменных, реакцию объекта на которые необходимо исследовать. В зависимости от значения  $K$  блок 6 передает управление блокам: 7 ( $k=1$ ), 8 ( $k=2$ ), 9 ( $k=3$ ), ..., 10 ( $k=K$ ). Блоком 11 выбирается соответствующий закон изменения граничных условий: синусоидальной (блок 12), прямоугольный (блок 13) или треугольный (блок 14) волны.

Собственно процесс решения системы уравнений (3.1) - (3.3) модели динамики состоит из последовательности вычислений для нахождения решения на новом временном слое (блок 15): 1) вычисление шага по временной координате; 2) интегрирование системы дифференциальных уравнений; 3) контроль точности вычислений. Далее вычислительный цикл повторяется либо до достижения стационарного состояния (если оно существует), либо до некоторого заданного момента времени.

В результате численного решения системы получаются распределения по пространственной координате и во времени

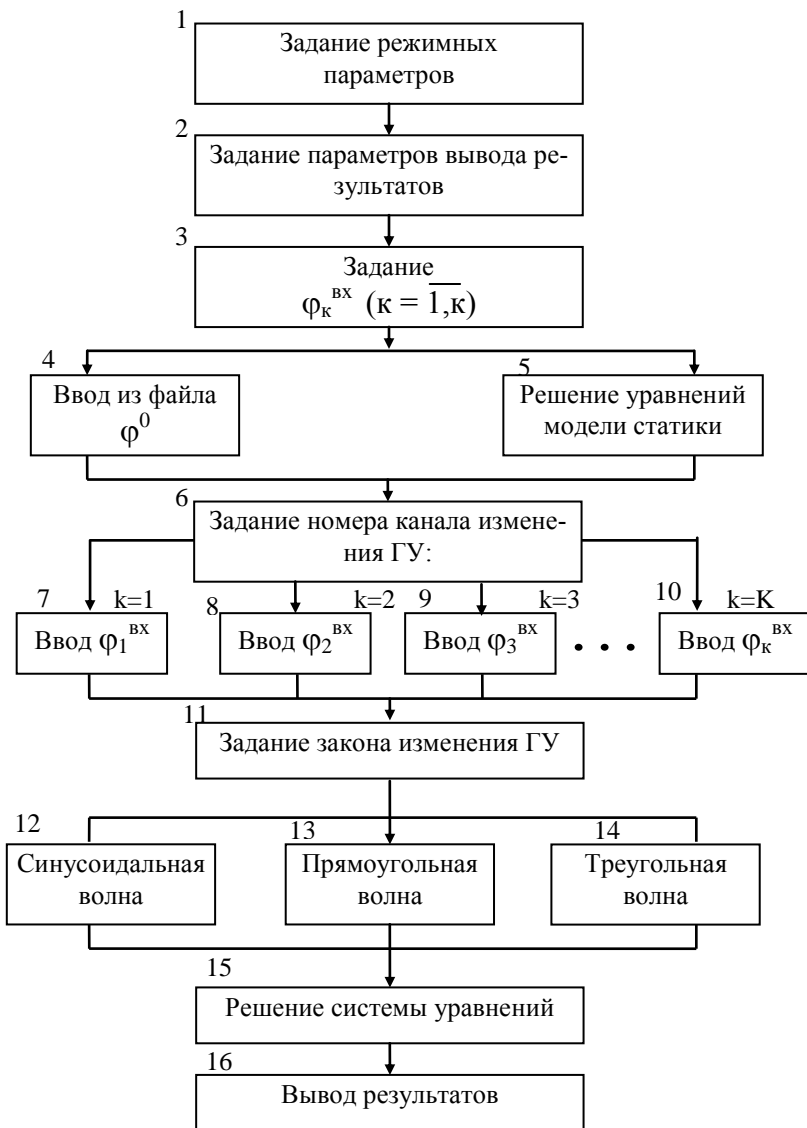


Рис. 3.1. Схема алгоритма моделирования динамической системы в колебательном режиме



выходных переменных процесса. Результаты моделирования могут быть выведены на печать, записаны в файл, представлены графически (блок 16).

Запись профилей переменных процесса в файл предназначена для длительного хранения результатов расчетов и дает возможность продолжать ранее прерванные вычисления.

Важным вычислительным средством при моделировании динамических систем является изучение влияния вариации параметров модели (т.е. констант скорости реакций, начальных условий и т.д.) на ее поведение. Это дает не только информацию, которая используется при идентификации и позволяет планировать дальнейшие эксперименты для проверки и улучшения модели, но и оценивать насколько существенно каждый компонент влияет на определение свойств системы. Этот анализ проводится посредством имитации, варьируя каждый параметр по очереди и повторяя расчет [41].

### **3.2. Численное моделирование процесса пиролиза бензина**

Наиболее общий подход к математическому моделированию процесса пиролиза заключается в численном интегрировании системы полных нестационарных уравнений (2.1)-(2.12).

В качестве разностной сетки рассматривается совокупность точек пересечения прямых  $l = i \cdot h, t = j \cdot \tau$  ( $i = 0, 1, \dots, I, J = 0, 1, \dots$ ) на плоскости  $(l, t)$ . Здесь  $t, l$  - текущее время и длина пиролизеовика;  $\tau, h$  - шаги интегрирования по времени и длине;  $I$  - число шагов интегрирования по длине. Шаги сетки  $h, \tau$  выбираются так, чтобы на отрезках  $0 \leq l \leq L, 0 \leq t \leq T$  укладывалось целое число шагов. Для оценки точности решения использовалась не одна разностная сетка и построенное на ней разностное решение, а целая последовательность решений на сетках с шагами  $\tau_1, h_1; \tau_2, h_2; \tau_3, h_3; \dots$ , стремящимися к нулю:  $\tau_n \rightarrow 0, h_n \rightarrow 0$  при  $n \rightarrow \infty$ . При выборе последовательности шагов обеспечивается неизменность отношения шага по времени к шагу по пространству. Для этого, выбрав начальные  $\tau_1, h_1$  (например, на основе условия Куранта с весовым коэффициентом), можно выбрать шаги более мелких сеток

по правилу:

$$\tau_2 = \frac{1}{2} \tau_1, \quad \tau_3 = \frac{1}{2^2} \tau_1, \dots, \quad \tau_n = \frac{1}{2^{n-1}} \tau_1, \dots$$

$$h_2 = \frac{1}{2} h_1, \quad h_3 = \frac{1}{2^2} h_1, \dots, \quad h_m = \frac{1}{2^{m-1}} h_1, \dots$$

Значение сеточной функции аппроксимирующей исходную функцию  $\varphi$  в точке сетки  $[i, j] = [ih, j\tau]$ , обозначается  $\varphi_i^j$ . Частные производные переменных в точке  $[i, j]$  аппроксимируются через значения функций в этой точке и в соседних точках. Коэффициенты уравнений модели в точках сетки  $[i, j]$  определяются точно и обозначаются  $a_j$ . Начальные и граничные условия (2.8)-(2.9) заменяются соответствующими условиями на границе сетки

$$\varphi[i, 0] = \varphi_i^0 \quad ; \quad i = 0, 1, \dots, I$$

$$\varphi[0, j] = \varphi_0^j \quad ; \quad j = 0, 1, \dots$$

Разностная аппроксимация системы (2.1)-(2.7) на основе схемы Кранко-Николсона [30] принимает вид (в индексной записи):

$$\frac{C_{ik}^{j+1} - C_{ik}^j}{\tau} + V_i^{j+1/2} \frac{C_{ik}^{j+1/2} - C_{i-1k}^{j+1/2}}{h} = \left( \frac{W_k}{\rho} \right)_i^{j+1/2}, \quad k = \overline{1, 6}; \quad (3.7)$$

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\tau} + V_i^{j+1/2} \frac{T_i^{j+1/2} - T_{i-1}^{j+1/2}}{h} = \left( \frac{2K_T}{r\rho C_p} (T_C - T) - \frac{1}{\rho C_p} \sum_{k=1}^6 \Delta H_k W_k \right)_i^{j+1/2}; \quad (3.8)$$

$$\frac{V_i^{j+1} - V_i^j}{\tau} + V_i^{j+1/2} \frac{V_i^{j+1/2} - V_{i-1}^{j+1/2}}{h} = \left( -\frac{1}{\rho_i} \frac{P_i - P_{i-1}}{h} - \xi \frac{V_i^2}{4r} \right)_i^{j+1/2}; \quad (3.9)$$

$$\frac{\rho_i^{j+1} - \rho_i^j}{\tau} + V_i^{j+1/2} \frac{\rho_i^{j+1/2} - \rho_{i-1}^{j+1/2}}{h} = \left( -\rho_i \frac{V_i - V_{i-1}}{h} \right)_i^{j+1/2}; \quad (3.10)$$

$$\rho_i^{j+1} = \rho_i^{j+1} RT_i^{j+1} \sum_{k=1}^6 C_{ik}^{j+1}; \quad (3.11)$$

где значения на промежуточном слое по времени  $(j+1/2)$  вычисляются по формуле

$$\varphi_i^{j+1/2} = (\varphi_i^{j+1} + \varphi_i^j) / 2.$$

Значения любой сеточной функции на верхнем (  $j + 1$ )-м временном слое будем определять с помощью итерационного процесса:

$$\varphi_i^{j+1} = \lim_{m \rightarrow \infty} \varphi_i^m,$$

где  $m$  - номер итерации.

Заменим в (3.7)-(3.11) искомые значения функций на (  $j + 1$ )-м слое их значениями на итерациях. В этом случае система принимает вид [32]:

$$\frac{C_{ik}^{m+1} - C_{ik}^j}{\tau} + \frac{(V_i^{m+1} + V_i^j)}{2} \times \frac{(C_{ik}^{m+1} + C_{ik}^j - C_{i-1k}^{m+1} - C_{i-1k}^j)}{2h} = \frac{1}{2} \left( \frac{W_{ik}^m}{\rho_i^{m+1}} + \frac{W_{ik}^j}{\rho_i^j} \right),$$

$$k = \overline{1,6}$$

$$\frac{T_i^{m+1} - T_i^j}{\tau} + \frac{(V_i^{m+1} + V_i^j)}{2} \times \frac{(T_i^{m+1} + T_i^j - T_{i-1}^{m+1} - T_{i-1}^j)}{2h} =$$

$$\frac{1}{2} \left( \frac{2K_t}{\tau \rho_i^{m+1} C_{pi}^{m+1}} (T_c - T_i^{m+1}) - \frac{1}{\rho_i^{m+1} C_{pi}^{m+1}} \sum_{k=1}^6 \Delta H_{ik}^{m+1} W_{ik}^{m+1} + \left( \frac{2K_t}{\tau \rho_i^j C_{pi}^j} (T_c - T_i^j) - \frac{1}{\rho_i^j C_{pi}^j} \sum_{k=1}^6 \Delta H_{ik}^j W_{ik}^j \right) \right);$$

$$\frac{V_i^{m+1} - V_i^j}{\tau} + \frac{(V_i^m + V_i^j)}{2} \times \frac{(V_i^{m+1} + V_i^j - V_{i-1}^{m+1} - V_{i-1}^j)}{2h} =$$

$$= \frac{1}{2} \left( -\frac{1}{\rho_i^m} \times \frac{p_i^m - p_{i-1}^m}{h} - \xi \frac{(V_i^m)^2}{4r} - \frac{1}{\rho_i^j} \times \frac{p_i^j - p_{i-1}^j}{h} - \xi \frac{(V_i^j)^2}{4r} \right);$$

$$\frac{\rho_i^{m+1} - \rho_i^j}{\tau} + \frac{(V_i^{m+1} + V_i^j)}{2} \times \frac{(\rho_i^{m+1} + \rho_i^j - \rho_{i-1}^{m+1} - \rho_{i-1}^j)}{2h} =$$

$$= \frac{1}{2} \left( -\rho_i^m \frac{V_i^{m+1} - V_{i-1}^{m+1}}{h} - \rho_i^j \frac{V_i^j - V_{i-1}^j}{h} \right);$$

$$p_i^{m+1} = R \rho_i^{m+1} T_i^{m+1} \sum_{k=1}^6 C_{ik}^{m+1}.$$

В качестве нулевой итерации берем значения функций с предыдущего слоя  $\varphi_i^0 = \varphi_i^j$ . Итерационный процесс прекраща-

ется, если различие в значениях сеточной функции на соседних итерациях станет меньше некоторой заданной малой величины. Значения функций, полученные на последней итерации  $m=M$  объявляются значениями на  $(j+1)$ -м временном слое:

$$\varphi_i^M = \varphi_i^{j+1}$$

Рассмотрим алгоритм решения уравнений математической модели динамики. Вначале задаются граничные условия для решения уравнений математической модели статики пиролиза бензина, получаемой из исходной системы (2.1) - (2.9) приравниванием к нулю всех частных производных по времени.

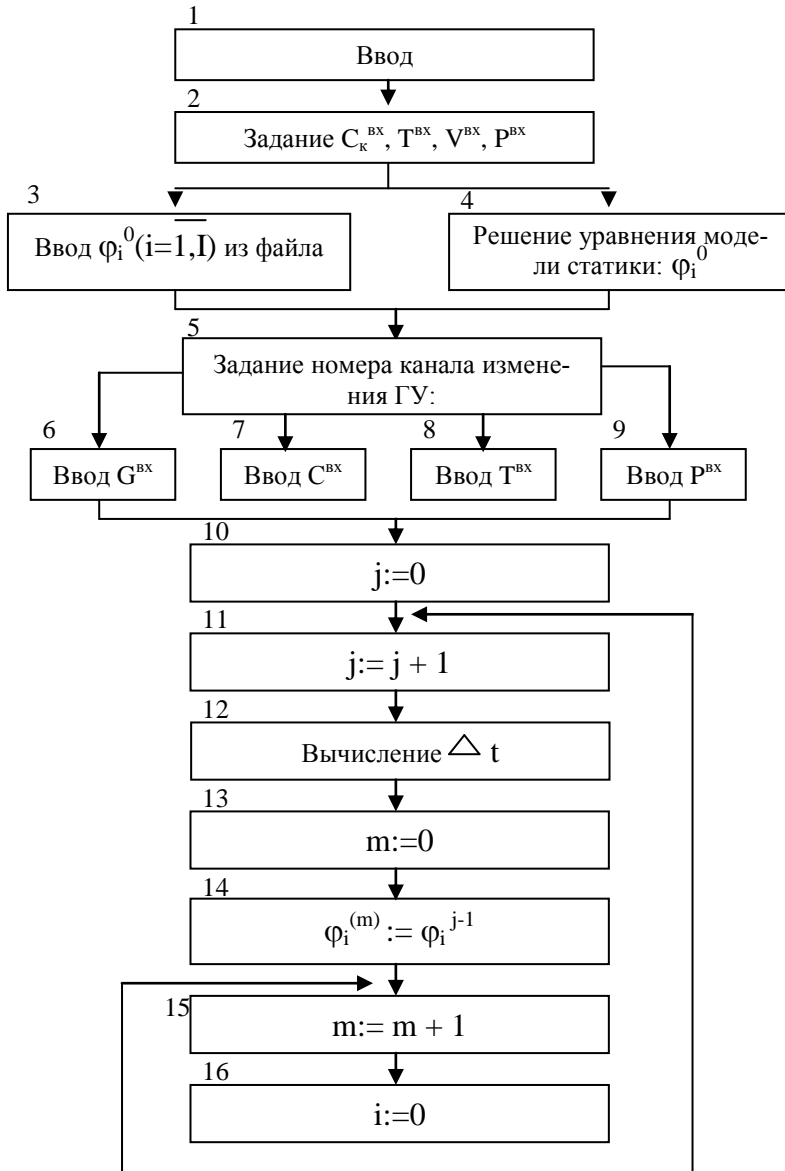
Решением уравнений статики находятся распределения выходных переменных по длине змеевика печи, которые определяют начальные условия (2.8) модели динамики. Затем задаются граничные условия (2.9) задачи динамики (в общем случае они являются различными функциями времени) и на основе схемы Кранко-Николсона решается система уравнений.

На рис. 3.2 приведена схема алгоритма решения уравнений (2.1) - (2.12) модели динамики.

В блоке 1 задается число  $I$  шагов интегрирования по длине пиролизмеевика, вычисляется шаг по времени на основе условия Куранта с весовым коэффициентом; задаются режимные параметры процесса вычислений. Блоком 2 вводятся граничные условия  $C_k^{ex} (k = \overline{1,6}), T^{ex}, V^{ex}, p^{ex}$ . Начальные условия модели вводятся блоком 3 из файла или получаются в результате решения статической модели в блоке 4. В блоке 5 задаются номера каналов изменения входных переменных, реакцию объекта на которые необходимо исследовать. В зависимости от значения  $N$  блок передает управление блокам:

6( $N=1$ ) - изменяется расход  $G^{ex}(t)$  смеси; 7( $N=2$ ) - изменяется концентрация  $C_k^{ex}(t)$ ; 8( $N=3$ ) - изменяется входная температура  $T^{ex}(t)$  смеси; 9( $N=4$ ) - изменяется входное давление  $p^{ex}(t)$  смеси.

Собственно процесс решения уравнений (2.1)-(2.12) мо-



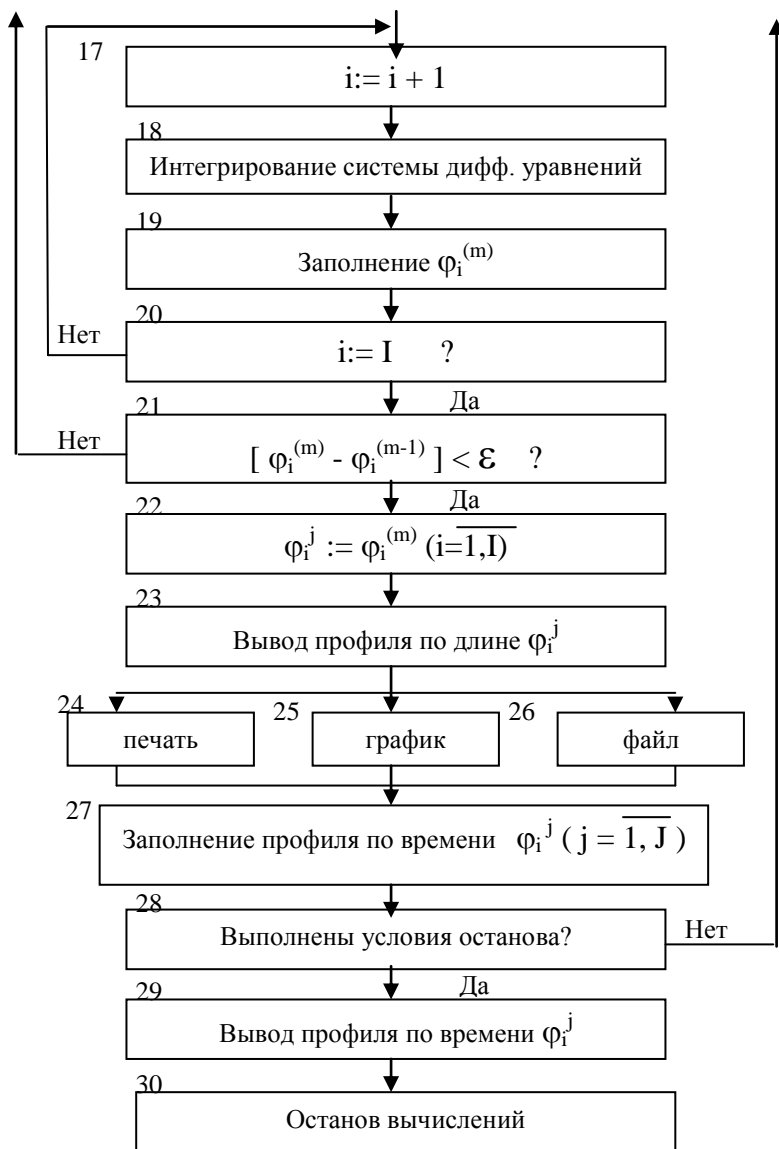


Рис.3.2. Схема алгоритма решения уравнения математической модели процесса пиролиза бензина

дели динамики осуществляется в блоках (10)-(28). Последовательность вычислений для нахождения решения на новом временном слое состоит из следующих шагов:

- вычисление шага по временной координате;
- вычисление профиля скорости потока;
- вычисление профиля плотности;
- вычисление профилей концентраций;
- вычисление профиля температуры;
- вычисление профиля давления;
- контроль точности вычислений.

Далее вычислительный цикл повторяется либо до достижения стационарного состояния (если оно существует), либо до некоторого заданного момента времени.

На каждом временном слое для достижения устойчивости счета производится пересчет профиля плотности [63].

Блок 23 производит вывод профилей по длине реактора выходных переменных процесса на печать (блок 24), график (блок 25) или в файл (блок 26). Одновременно на каждом временном слое запоминаются значения всех переменных процесса по времени. В блоке 28 проверяется условие достижения выходными переменными своих установившихся значений. Принимается, что переходные процессы в объекте закончились, если расчетные значения выходных переменных в момент времени  $t$ , решение уравнений модели отличаются от значений переменных, полученных в следующий момент времени  $t+\Delta t$ , не более чем на 0,5%. При выполнении этого условия управление передается блоку 29, в противном случае - блоку 11. Блок 29 производит вывод профилей по времени выходных переменных процесса на печать, график, в файл.

### **3.2.1. Результаты численного моделирования процесса пиролиза бензина**

В результате численного расчета математической модели получаются распределения по длине реактора и во времени выходных переменных процесса: массовых концентраций, температуры, скорости потока, давления и плотности. По полученным

профилям можно оценить влияние различных режимных параметров процесса на выход целевых и побочных продуктов пиролиза бензина.

Для модельной задачи пиролиза бензина (длина пирозмеевика  $L=70\text{м}$ ; внутренний радиус змеевика  $\tau=0,1\text{м}$ ; температура смеси на выходе из реактора  $T^{\text{вых}}=973\text{ }^{\circ}\text{K}$ ; соотношение пар-сырьё ( $\theta=0,5$ ) на рис. 3.3 показаны изменения выходов продуктов пиролиза по длине змеевика при расходе сырья  $G=2500\text{ кг/ч}$ . На рис. 3.4 представлены распределения бензина и этилена по длине змеевика при различных заданиях расхода сырья.

Зависимость относительных выходов бензина и этилена от средней температуры стенки змеевика при различных расходах сырья показана на рис. 3.5; зависимость показателя качества - на рис. 3.6.

Использование динамической модели позволяет исследовать не только стационарные режимы, но и влияние различного рода возмущений на течение пиролиза бензина.

Результаты численного моделирования процесса пиролиза могут быть использованы для целей оптимального конструирования реакторов, выбора оптимальных режимов работы, выбора и расчета систем автоматического управления.

### **3.2.1.1. Численное моделирование процесса пиролиза бензина в условиях периодического изменения входных параметров**

При расчете динамических систем, в которых входные параметры изменяются периодически, необходимо знать не только предельные эффективности, но и в зависимости от средних значений выходных переменных. Также важно оценить влияние динамических свойств объекта на показатель эффективности периодического процесса.

На базе представленной модели (2.1)-(2.12) проводилось исследование влияния на выход целевых и побочных продуктов пиролиза углеводородов вынужденных гидродинамических периодических воздействий, генерируемых в реакционной смеси внешним источником. В качестве периодического возмущения



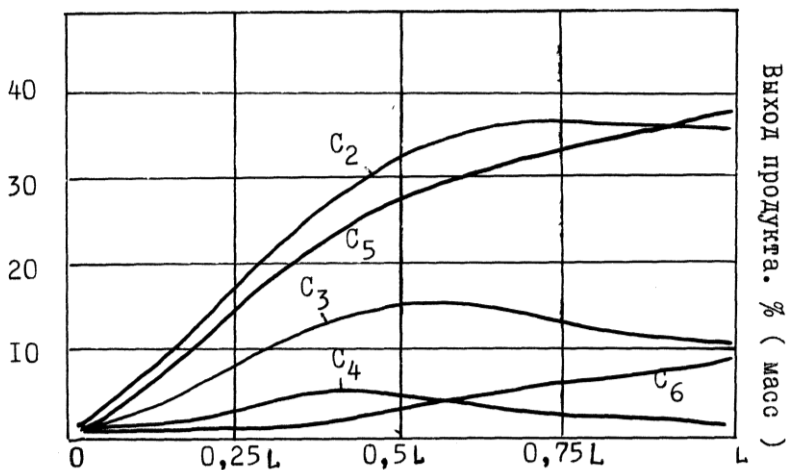
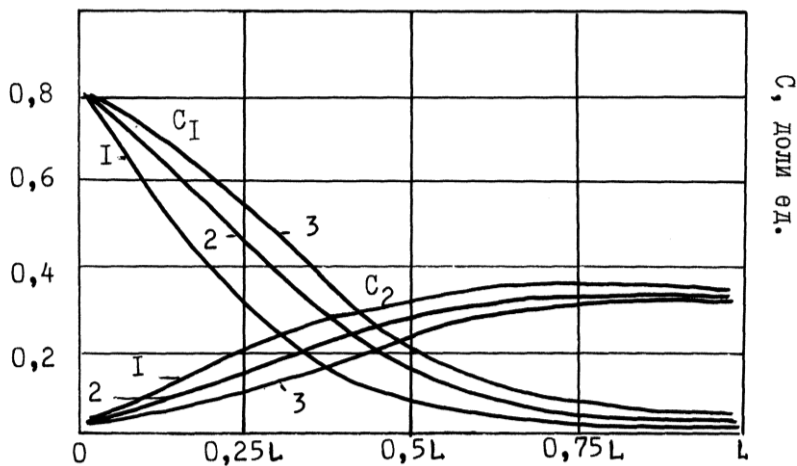
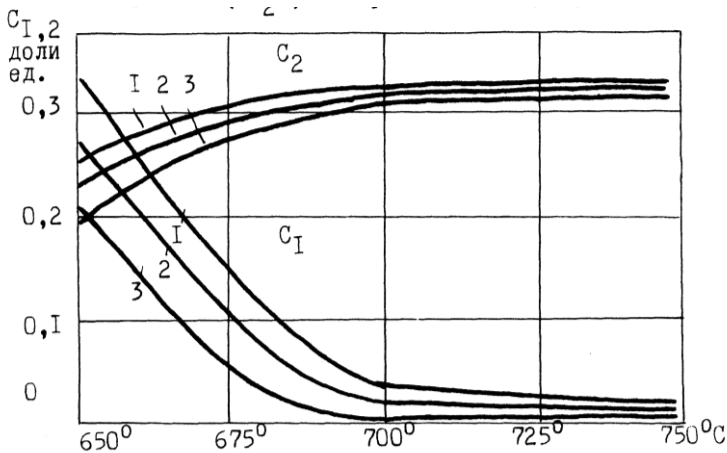


Рис. 3.3. Изменение выходов продуктов пиролиза по длине змеевика



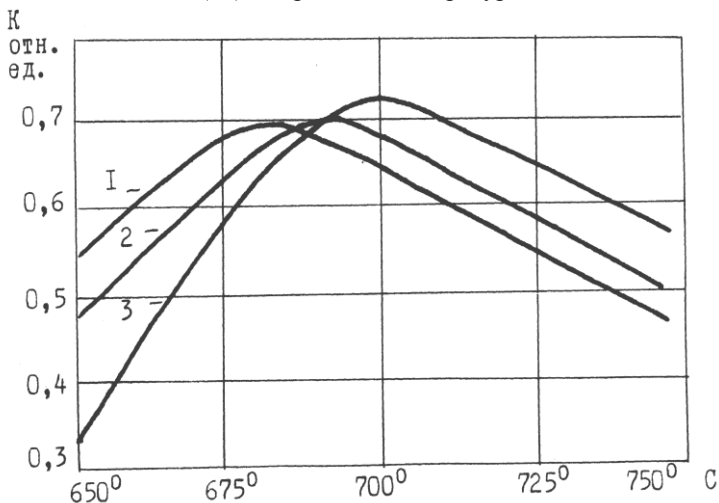
Нагрузки по сырью: I -  $G = 2000 \text{ кг/ч}$ ;  
 2 -  $G = 2500 \text{ кг/ч}$ ; 3 -  $G = 3000 \text{ кг/ч}$ .

Рис. 3.4. Распределение концентрации бензина  $C_1$  и этилена  $C_2$  по длине змеевика



Нагрузка по сырью: I -  $G = 2000$  кг/ч; 2 -  $G = 2500$  кг/ч;  
3 -  $G = 3000$  кг/ч.

Рис. 3.5. Зависимость относительных выходов бензина ( $C_1$ ) и этилена ( $C_2$ ) от средней температуры стенки змеевика



Нагрузка по сырью: I -  $G = 2000$  кг/ч; 2 -  $G = 2500$  кг/ч;  
3 -  $G = 3000$  кг/ч.

Рис. 3.6. Зависимость показателя качества процесса от средней температуры стенки змеевика

выбрана нагрузка на вход потока змеевика при условии, что среднее значение расхода сырьевой смеси на период времени является постоянным:

$$\frac{1}{T_1} \int_t^{t+T_1} G(t) dt = const. \quad (3.12)$$

В этом случае граничное условие математической модели представляет собой периодическое колебание расхода паро-сырьевой смеси на входном конце реакционной трубы:

$$G(0, t) = F(t),$$

где  $F(t)$  -периодическая функция с периодом времени  $T_1$ .

Для модельной задачи пиролиза бензина периодическая функция  $G(0, t)$  выбрана в виде

$$G(0, t) = G_{cp} + \Delta G \sin \omega_1 t. \quad (3.13)$$

Здесь  $G_{cp}$  -среднее значение расхода паро-сырьевой смеси;  $\Delta G$  -начальная амплитуда волны;  $\omega_1$  - угловая частота колебаний, связанная с частотой  $f$  соотношением  $\omega_1 = 2\pi f$ ; период  $T_1 = 1/f$ . Значение  $\Delta G$  для всех расчетов выбиралось равным 15% от  $G_{cp}$

Как показали результаты расчетов изменения концентраций продуктов пиролиза (пиробензина  $C_1$ , этилена  $C_2$ , пропилена  $C_3$ , фракции  $C_4$ , суммы газообразных продуктов  $C_5$ , суммы жидких продуктов  $C_6$ ) на выходе из реактора в условиях периодического управления расходом сырья на входе реактора (в установившемся режиме) носят квазипериодический характер (рис. 3.7). С наибольшей амплитудой колеблется концентрация пиробензина, с наименьшей - концентрация этилена.

Относительные выходы продуктов пиролиза от частоты показаны на рис. 3.9. Изменения показателя качества процесса от циклической частоты при различных нагрузках по сырью представлены на рис. 3.10.

Численное моделирование показывает, что с увеличением угловой частоты  $\omega$  свыше  $10\pi$  колебание расхода сырья на ходе в змеевик практически не оказывает влияние на выход продуктов пиролиза на конце змеевика, то есть процесс становится квазистатическим (рис.3.8). Наибольший эффект проявляется при ко-

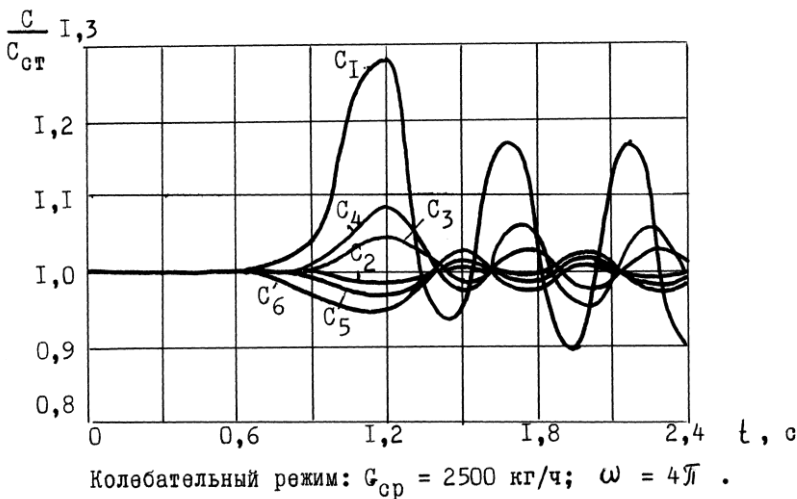


Рис. 3.7. Зависимость относительных выходов продуктов пиролиза от времени на конце змеевика

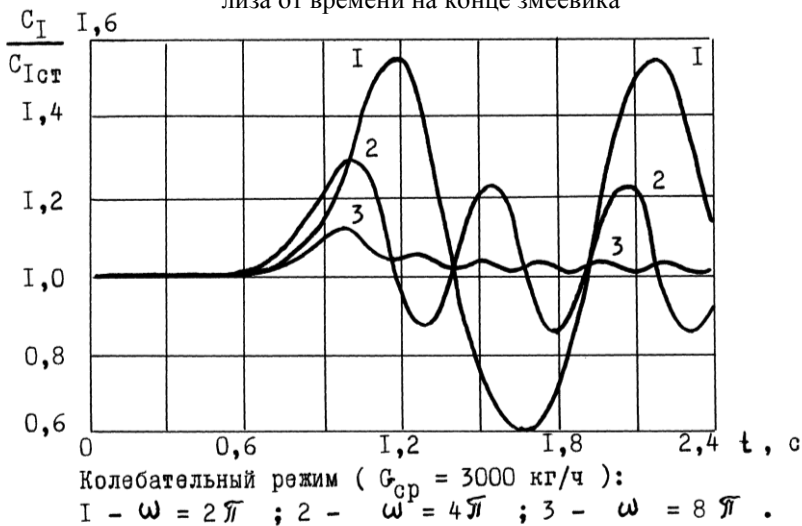


Рис. 3.8. Зависимость относительного выхода продукта  $C_1$  от времени на конце змеевика при различных значениях угловой частоты  $\omega$

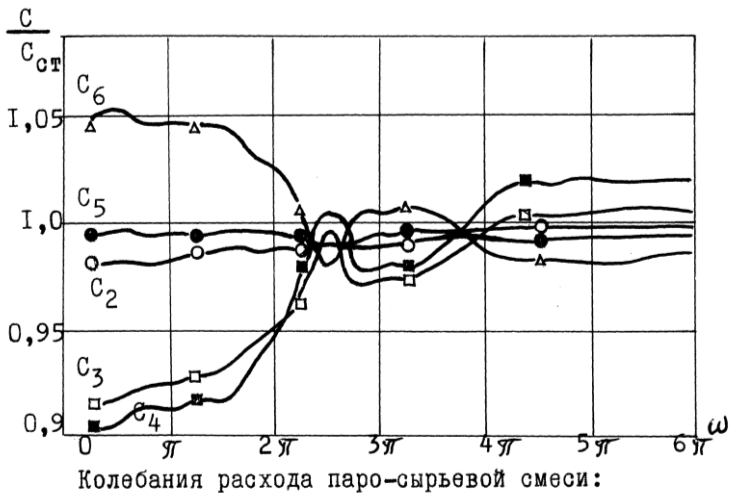


Рис. 3.9. Зависимость относительных выходов продуктов пиролиза от угловой частоты  $\omega$

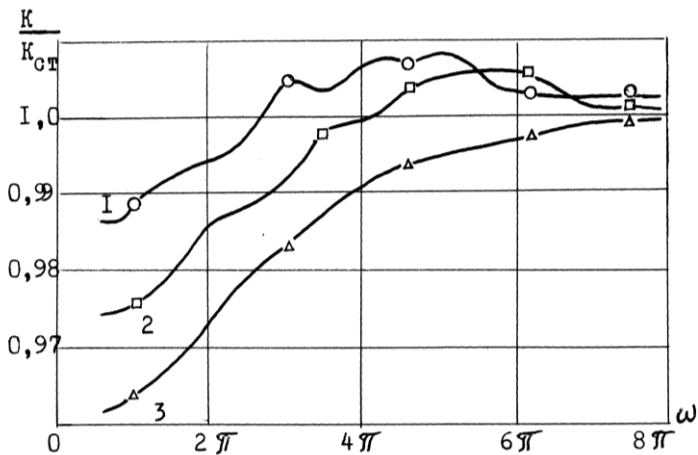


Рис. 3.10. Зависимость показателя качества процесса от частоты  $\omega$  при различных нагрузках по сырью

лебаниях с периодом порядка времени пребывания смеси в реакционной зоне. В периодическом режиме при уменьшении степени превращения (конверсии) сырья происходит увеличение выхода пропилена и фракции С<sub>4</sub> с одновременным уменьшением выхода этилена и побочных продуктов. Причем относительный выход этилена увеличивается при уменьшении средних нагрузок на входе реактора (от 3000 кг/ч до 2000кг/ч).

Проведены также исследования влияния периодического изменения входной температуры сырья на ход течения процесса пиролиза. При этом среднее значение входной температуры является постоянным:

$$\frac{1}{T_2} \int_t^{t+T_2} T^{bx}(t) dt = const.$$

Периодическая функция  $T(0,t)$  представлена в виде

$$T(0,t) \equiv T^{bx}(t) = T_{cp} + \Delta T \sin \omega_r t .$$

Здесь  $T_{cp}$ - средняя температура сырья,  $\Delta T$  - начальное значение амплитуды волны;  $\omega_r$  -угловая частота колебаний. Значение  $\Delta T$  для всех расчетов выбиралось равным 25 % от  $T_{cp}$ .

В результате численных расчетов получены распределения продуктов пиролиза (пиробензина - рис. 3.11 и фракции С<sub>4</sub>- рис. 3.12) в различные моменты времени при колебании входной температуры сырья. Колебания входной температуры приводит к квазипериодическим изменениям относительных (относительно стационарного состояния) выходов продуктов пиролиза во времени (рис. 3.13). Относительный выход этилена от частоты колебаний входной температуры при различных нагрузках по сырью (рис. 3.14) имеет незначительно выраженный максимум. Относительные выходы продуктов пиролиза от циклической частоты  $\omega$  носят приближенно монотонный характер и при увеличении  $\omega$  стремятся к стационарному состоянию (рис. 15)

В исследуемом диапазоне частот колебания входной температуры сырья (до  $10\pi$ ) значения показателя качества (при различных нагрузках по сырью) ниже среднего показателя стационарного процесса и постепенно к нему приближаются при увели-

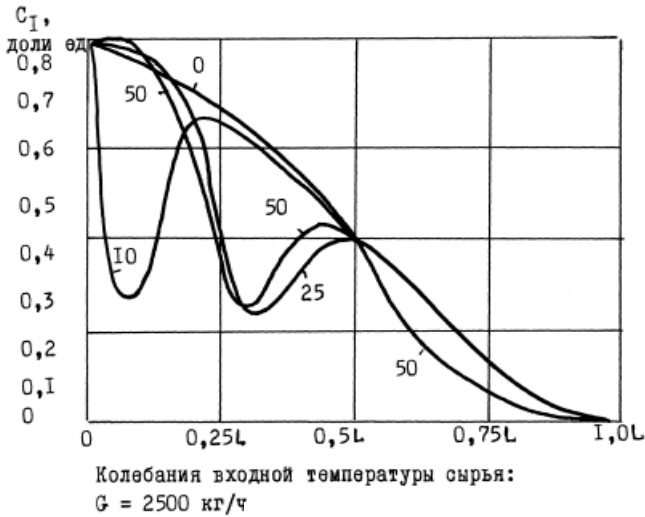


Рис. 3.11. Распределение продукта  $C_1$  по длине змеевика в различные моменты времени (шаг 1 с)

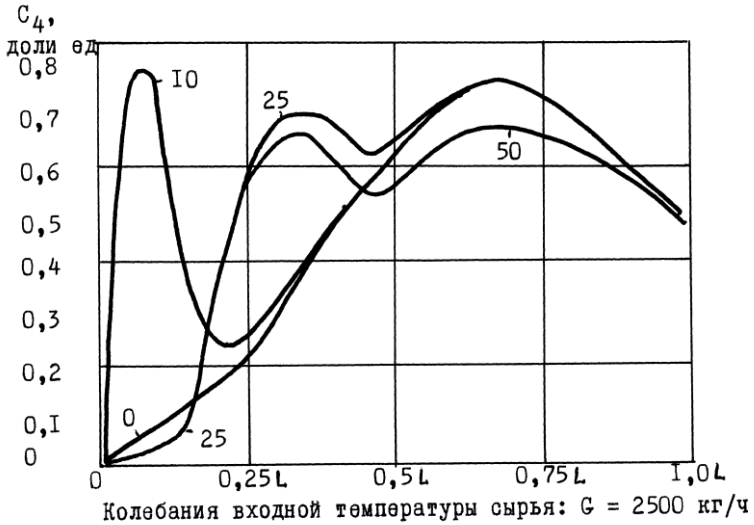
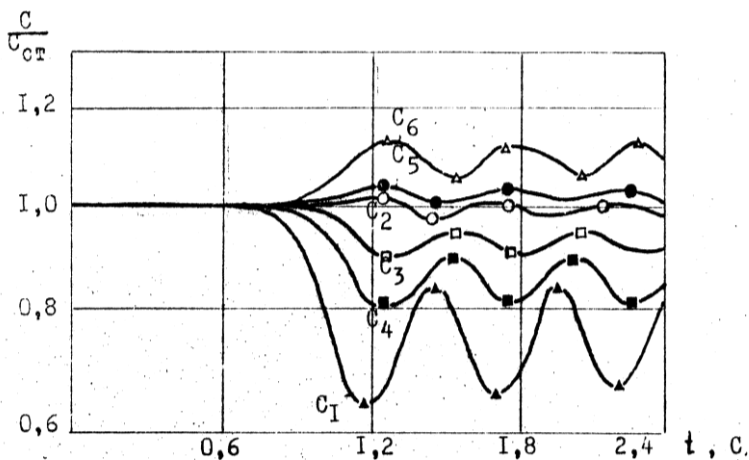
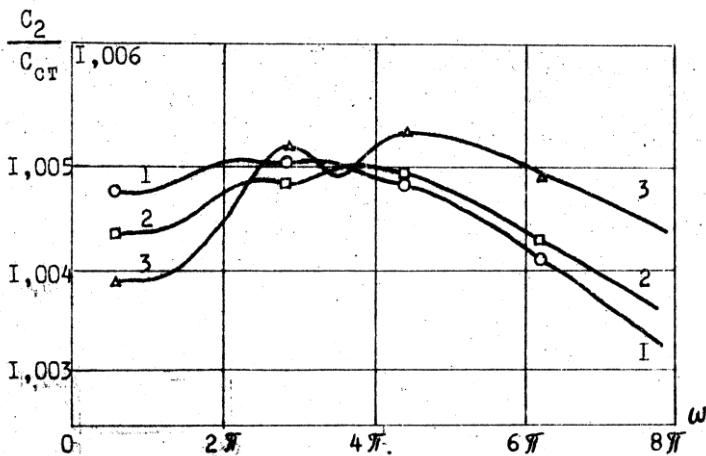


Рис. 3.12. Распределение продукта  $C_4$  по длине змеевика в различные моменты времени (шаг 1 с)



Колебания входной температуры сырья:  $G = 2500$  кг/ч,  
 $\omega = 4 \text{ Я}$

Рис. 3.13. Зависимость относительных выходов продуктов пиролиза от времени на конце змеевика



Колебания входной температуры сырья: 1 -  $G = 2000$  кг/ч;  
 2 -  $G = 2500$  кг/ч; 3 -  $G = 3000$  кг/ч

Рис. 3.14. Зависимость относительного выхода продукта  $C_2$  от частоты при различных нагрузках по сырью



чении частоты (рис. 3.16).

Таким образом, исследование показало, что в установившемся периодическом режиме процесса пиролиза бензина (при управлении расходом сырья на входе реактора) происходит изменение относительных выходов продуктов пиролиза при различных значениях частоты колебаний. В итоге можно выбрать необходимый вид, частоту и амплитуду колебаний с целью интенсификации процесса пиролиза углеводородов. Колебания входной температуры сырья ухудшают экономические показатели процесса.

### 3.3. Численное моделирование процесса регенерации неподвижного слоя катализатора

Разностная аппроксимация системы уравнений (2.23)-(2.29) на основе абсолютно устойчивой схемы "бегущего счета" ( $\tau^2, h$ ) принимает вид (в индексной записи) [29,30]:

$$\frac{M_i^{j+1} - M_i^j}{\tau} + u \frac{M_i^{j+1} + M_i^j - M_{i-1}^{j+1} - M_{i-1}^j}{2h} = K_1 W_i^{j+1/2}; \quad (3.14)$$

$$\frac{G_i^{j+1} - G_i^j}{\tau} = K_2 W_i^{j+1/2}; \quad (3.15)$$

$$\frac{T_i^{j+1} - T_i^j}{\tau} + u^* \frac{T_i^{j+1} + T_i^j - T_{i-1}^{j+1} - T_{i-1}^j}{2h} = K_3 W_i^{j+1/2}; \quad (3.16)$$

где  $W_i^{j+1/2} = W_i(t_{j+1/2})$ .

Для вычисления  $W_i$  на слое  $t_{j+1/2}$  в работе используется пересчет  $W_i$  на каждом слое временной сетки сначала на слой  $t_{j+1}$ , а затем на слой  $t_{j+1/2}$  по формуле

$$W_i(t_{j+1/2}) = (W_i(t_{j+1}) + W_i(t_j)) / 2.$$

Схема алгоритма решения математической модели процесса регенерации неподвижного слоя катализатора представлена на рис. 3.17.

В блоке 1 задается число  $I$  шагов интегрирования по длине реактора и режимные параметры процесса вычислений. Блоком 2

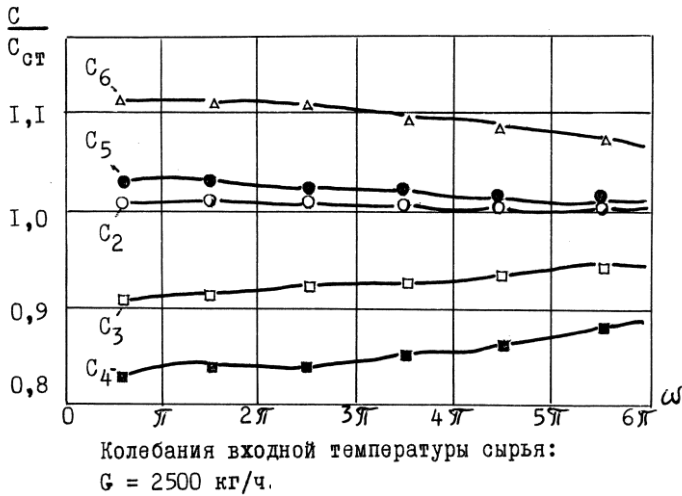


Рис. 3.15. Зависимость относительных выходов продуктов от угловой частоты  $\omega$

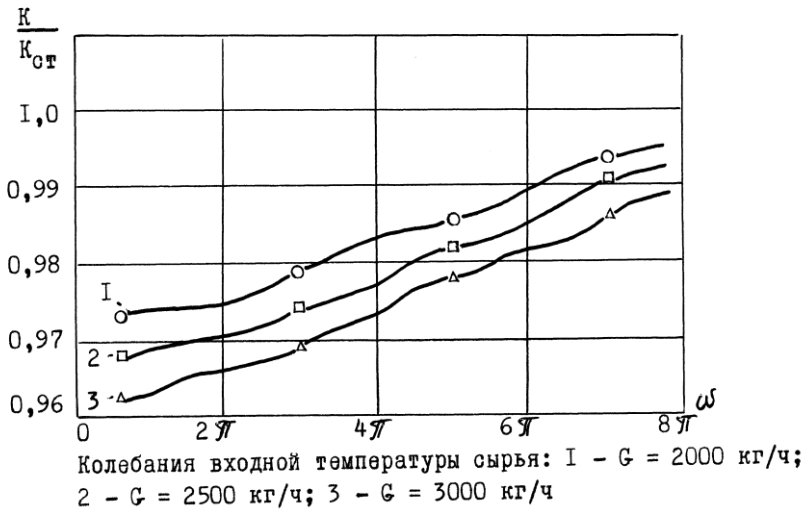


Рис. 3.16. Зависимость показателя эффективности процесса от частоты  $\omega$  при различных нагрузках по сырью

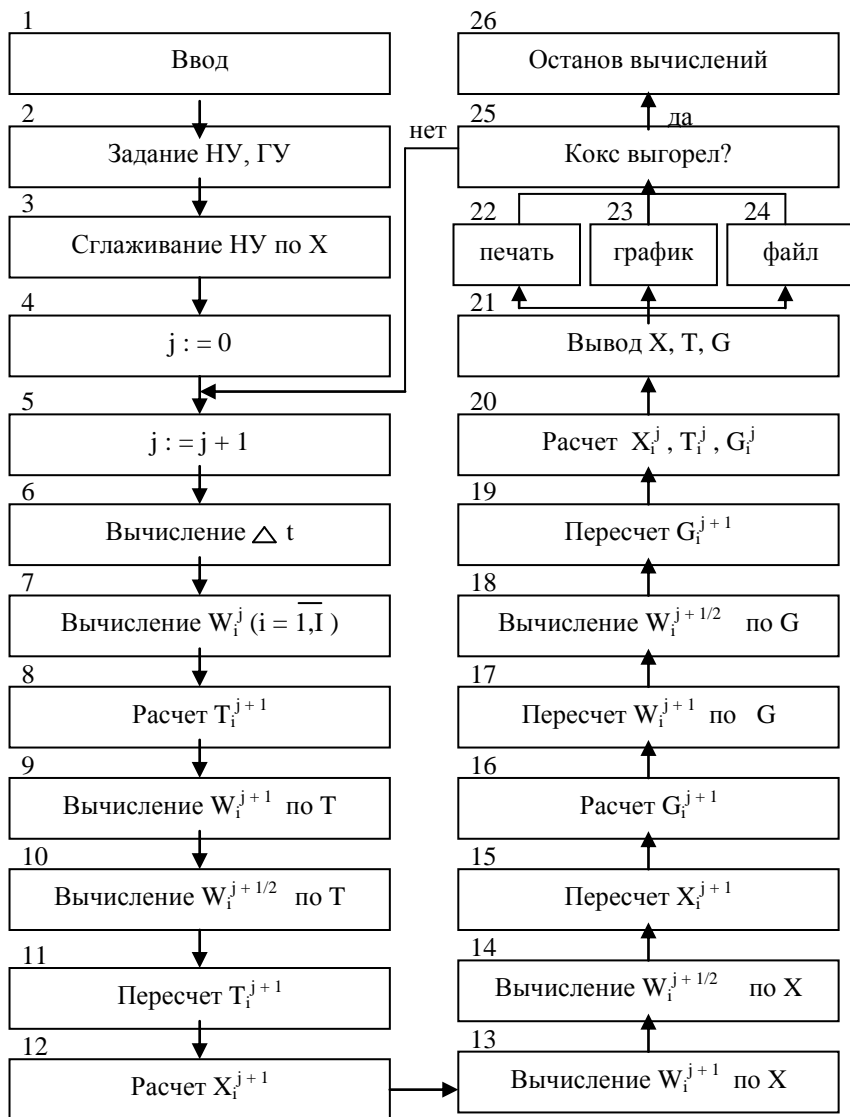


Рис. 3.17. Схема алгоритма решения уравнения математической модели процесса регенерации катализатора

вводятся начальные  $G_0$ ,  $T_0$  граничные  $M^{bx}$ ,  $T^{bx}$  условия. В блоке 3 производится расчет (сглаживание) начальных условий по кислороду путем решения системы уравнений (2.30)-(2.31) усовершенствованным методом Эйлера. Собственно процесс решения уравнений (2.23)-(2.29) модели осуществляется в блоках 4-25.

Последовательность вычислений для нахождения решения на новом временном слое состоит из следующих шагов:

- вычисление шага по временной координате (блок 6);
- расчет профиля температуры (блоки 7-11);
- расчет профиля концентраций кислорода (блоки 12-15);
- расчет профиля концентрации углистых отложений (блоки 16-19)

Расчет профилей (распределений по длине реактора) переменных процесса осуществляется в несколько этапов:

- расчет правых частей уравнений на предыдущем временном слое;
- расчет профиля переменной процесса;
- пересчет правых частей уравнений на новом временном слое для данной переменной процесса;
- вычисление правых частей на промежуточном слое по времени;
- пересчет профиля переменной процесса с использованием полученных значений правых частей на промежуточном слое по времени,

Окончательный расчет профилей переменных процесса производится в блоке 20. Блок 21 производит вывод профилей по длине реактора выходных переменных процесса на печать (блок 22), график (блок 23) или в файл (блок 24). В блоке 25 проверяется условие окончания процесса. Если среднее значение концентрации остаточного кокса превышает 0.0001 вес доли, то управление передается блоку 5 (происходит повторный цикл вычислений на новом временном слое), в противном случае происходит останов вычислений (блок 26).

### 3.3.1. Результаты численного моделирования процесса регенерации

Для модельной задачи ( $L=1\text{м}$ ) проведены расчеты с различными начальными распределениями концентрации кокса по длине слоя катализатора и скоростью  $u^*$  движения центра масс. В результате получены профили распределения функций  $M$ ,  $T$ ,  $G$  по длине слоя катализатора в дискретные моменты времени с шагом 1 сек. Окончание процесса - когда среднее значение концентрации остаточного кокса не превышает 0,0001 вес. доли.

**Расчет 1.** Распределение кокса по длине слоя катализатора равномерно (рис. 3.18-3.20).

На рис. 3.18 представлены графики распределения концентрации кислорода  $M$  по длине реактора в различные моменты времени. Концентрация кислорода в слое с течением времени сначала падает почти до нуля, а затем постепенно возрастает, и к концу процесса регенерации почти весь кислород проходит через слой катализатора без расхода на реакцию. На рис. 3.19 представлены графики распределения температуры  $T$  слоя катализатора по длине реактора. Из графиков видно, что температура процесса с течением времени возрастает, и максимальное ее значение перемещается вдоль слоя катализатора по ходу движения газового потока. На рис. 3.20 представлены графики распределения концентрации кокса на катализаторе по длине реактора. Концентрация кокса в слое с течением времени равномерно падает от начальной до минимальной.

**Расчет 2.** Концентрация кокса по длине слоя катализатора падает по линейному закону. (рис. 3.21-3.23).

Распределение концентрации кислорода отличается более быстрым падением до нуля в начале процесса по отношению к расчету 1 (рис. 3.21). Температура процесса более неравномерна и достигает очень высоких величин (рис.3.22). Распределение концентрации кокса характеризуется медленным уменьшением в конце процесса (рис. 3.23).

**Расчет 3.** Концентрация кокса по длине слоя катализатора возрастает по линейному закону (рис. 3.24-3.26)

В отличие от расчета 1, концентрация кислорода до нуля в начале процесса не падает и более быстро возрастает (рис.3.24).

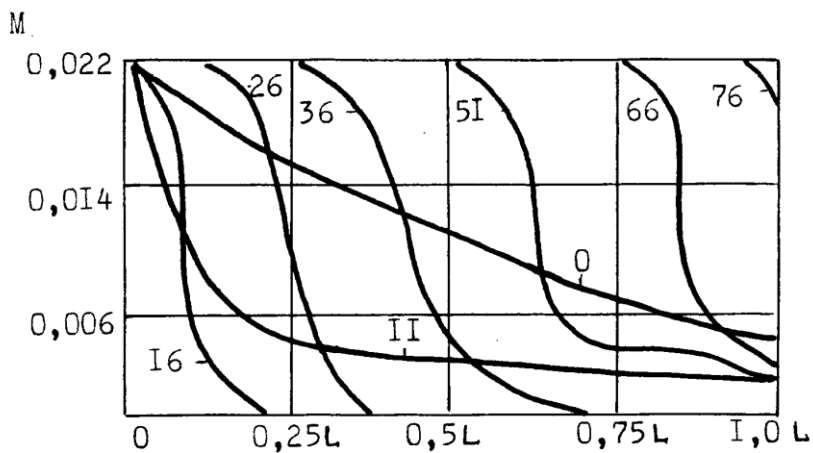


Рис. 3.18. Распределение концентрации кислорода

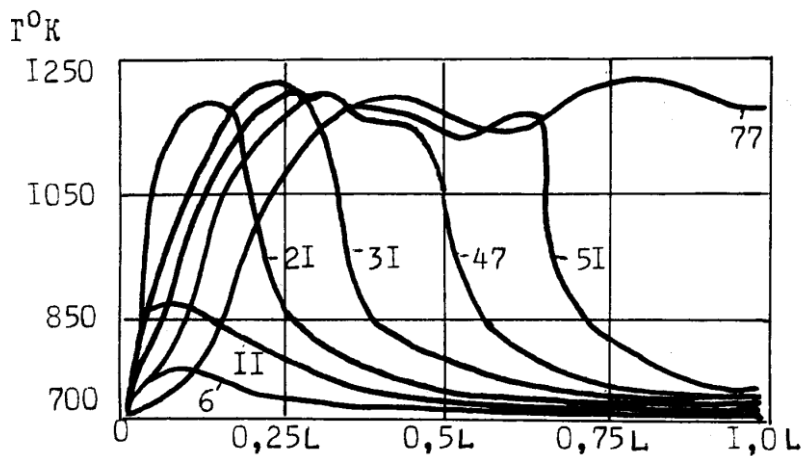


Рис. 3.19. Распределение температуры процесса

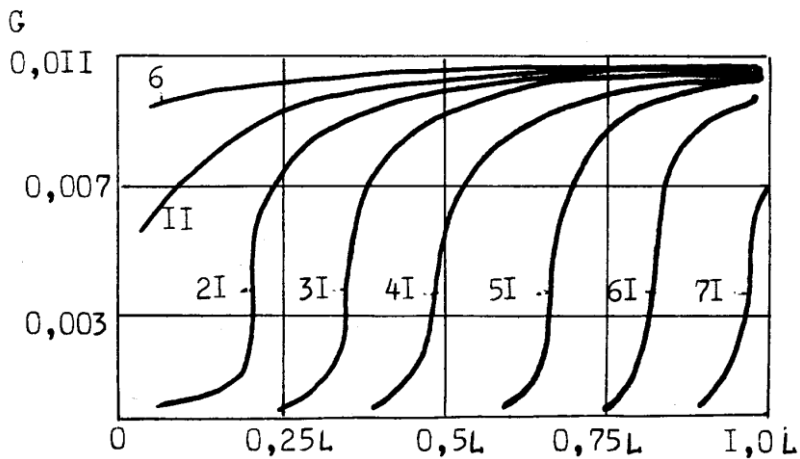


Рис. 3.20. Распределение концентрации кокса

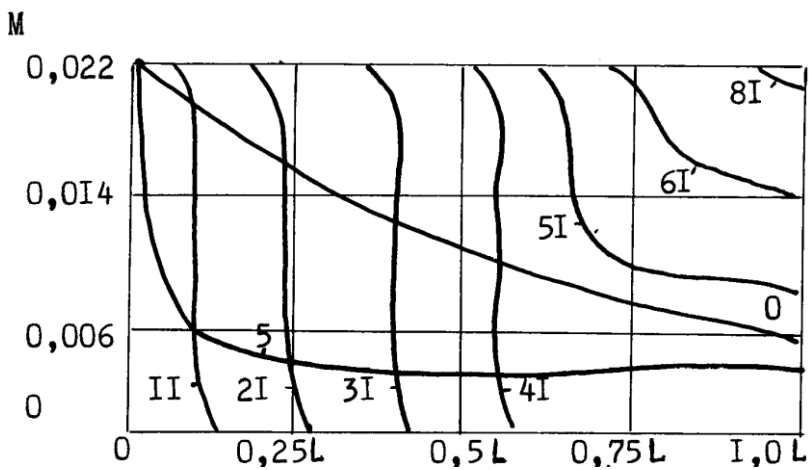


Рис. 3.21. Распределение концентрации кислорода

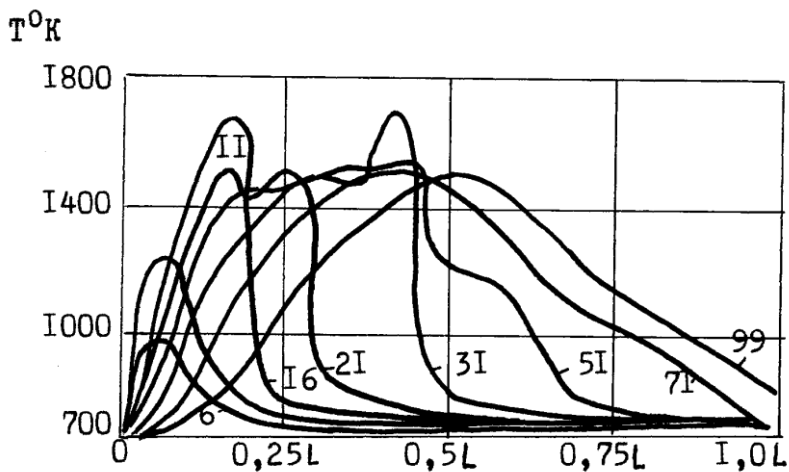


Рис. 3.22. Распределение температуры процесса

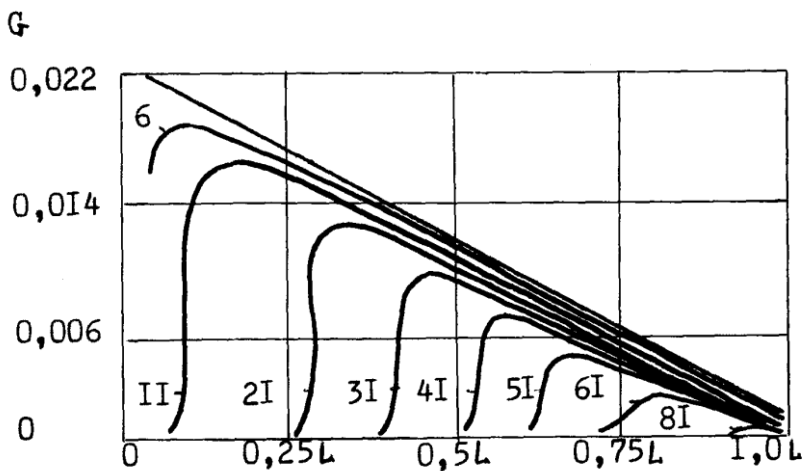


Рис. 3.23. Распределение концентрации кокса



Температура  $T$  более интенсивно нарастает на конце слоя катализатора (рис.3.25). Выжиг кокса наиболее интенсивен в середине слоя катализатора и медленно кокс выгорает в начале слоя (рис.3.26).

**Расчет 4.** Модельная задача. Скорость движения центра масс  $u^*$  увеличена в десять раз (рис. 3.27-3.28).

Температура процесса растет равномерно и четко выражено перемещение ее максимального значения вдоль слоя катализатора по ходу движения потока. При этом наиболее интенсивная область выгорания кокса с течением времени также перемещается по длине реактора.

Анализируя результаты расчетов (представленных на графиках), видно, что горение кокса протекает в ярко выраженной зоне, которая перемещается вдоль слоя катализатора в направлении движения газового потока с возрастанием температуры. Из-за концентрации тепла в зоне реакции могут наблюдаться очень высокие температуры, которые приводят к порче катализатора и оборудования.

Как правило, оптимальные условия основного процесса получения целевого продукта ограничиваются максимально допустимой температурой при регенерации; и в этом случае основной оптимизации всего процесса являются расчет температурного поля и профиля распределения угля по толщине слоя катализатора [60].

Минимальная длительность цикла регенерации обеспечивается при таком применении расхода воздуха, когда огибающая температурных пиков по всем слоям приближена к максимальному уровню. В этом случае можно говорить о суботимальном управлении процессом регенерации.

На основании многочисленных расчетов, а также сравнении полученных результатов с экспериментальными данными, можно утверждать, что принятая математическая модель процесса регенерации пористого катализатора удовлетворительно отражает существенные стороны реального процесса. Отметим также, что разработанный алгоритм решает задачу процесса регенерации с достаточной точностью для качественного описания процесса. Принятая модель и алгоритм ее численного расчета могут быть

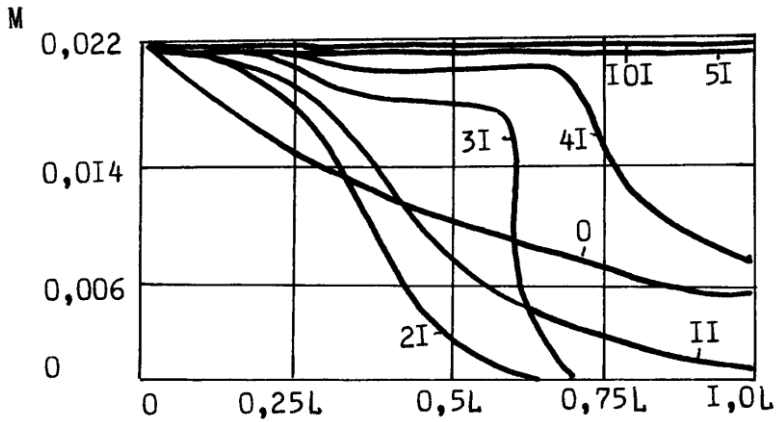


Рис. 3.24. Распределение концентрации кислорода

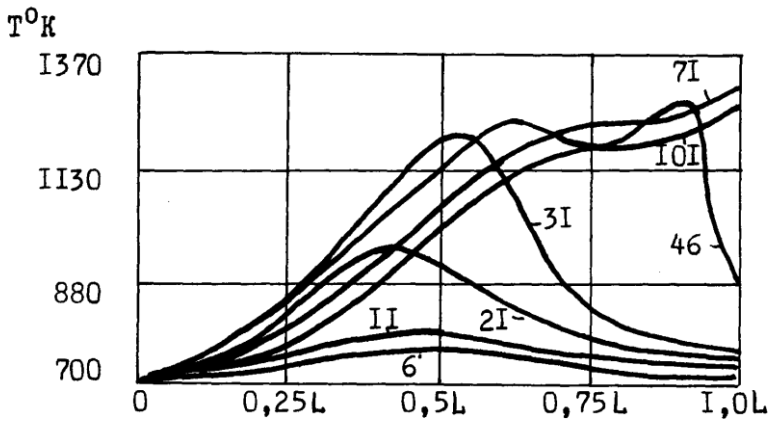


Рис. 3.25. Распределение температуры процесса

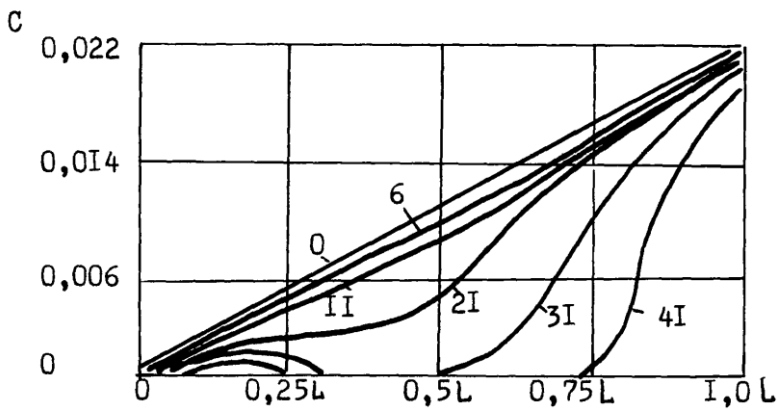


Рис. 3.26. Распределение концентрации кокса

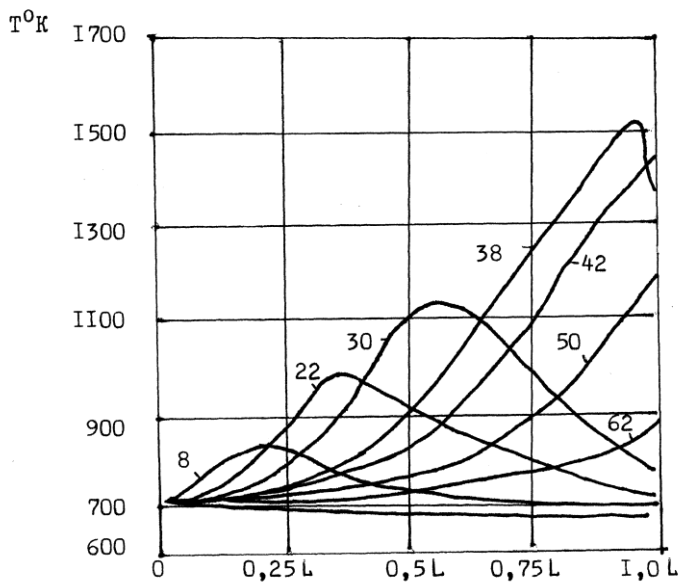


Рис. 3.27. Распределение температуры процесса

применены для задач идентификации и оптимизации.

### 3.4. Адаптация разностных схем для численного моделирования колебательных динамических процессов

Вычислительные эксперименты показали, что предельно допустимый устойчивый шаг по времени для разностных схем Кранко-Николсона и «бегущего счета» составляет 70-75 % от шага, определяемого достаточным критерием устойчивости для схемы, аппроксимирующей только линейные слагаемые в определяющих уравнениях. Для оценки скорости сходимости построенных адаптивных разностных схем анализировалось влияние числа узлов интегрирования по пространственным переменным по результатам вычислений. Дискретные решения на сетках 50 x 100 и 100 x 100 оказались достаточно близкими, что может служить практическим подтверждением сходимости решения поставленных задач. Контроль правильности вычислений осуществлялся также по соблюдению балансного соотношения

$$G = \rho VS$$

(для стационарных пиролизных процессов), дисбаланс, которого составлял лишь доли процента в интервале времени, соответствующем 10 циклам времени пребывания смеси в реакторе. Удобным для практических расчетов в колебательных режимах оказался выбор шага по времени на основе следующего соотношения:

$$\gamma \frac{u\tau}{h} \leq 1 \quad , \quad 1 \leq \gamma \leq 10, \quad (3.17)$$

где  $U$  - скорость движения центра масс динамического процесса.

С учетом условия (3.17) на основе экспериментальных данных получены зависимости шага по времени (относительно стационарного состояния) от периода колебаний (рис.3.29). При этом квазипериодические колебания устанавливались на выходе системы (с аналитическим и графическим контролем) примерно за 150-300 итераций в зависимости от вида, частоты и ам-

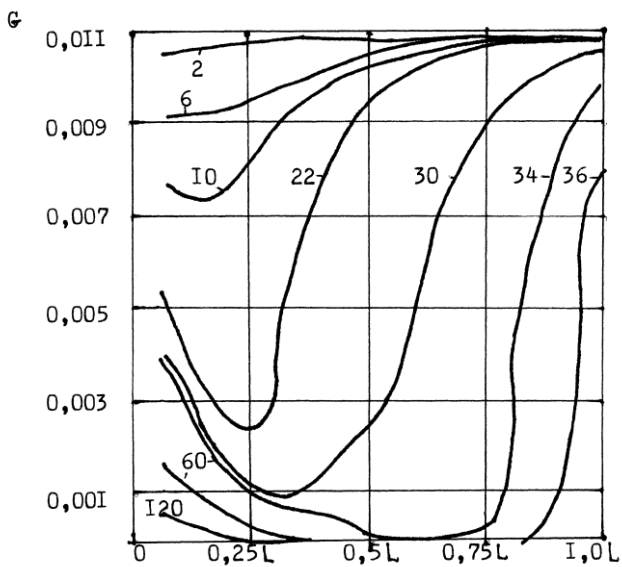
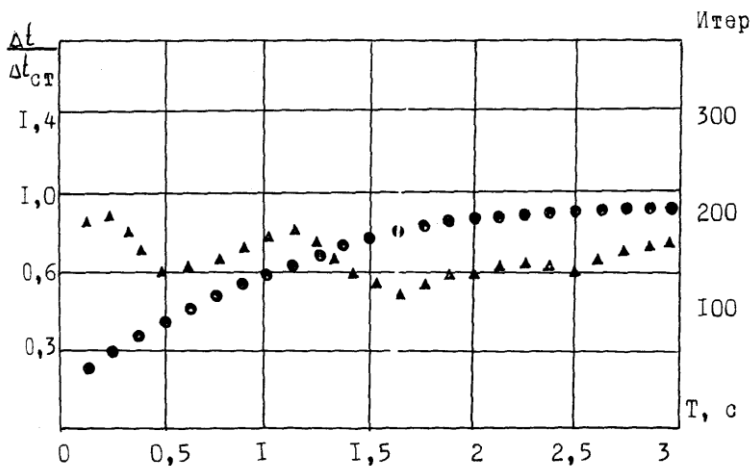


Рис. 3.28. Распределение концентрации кокса



- ▲ - зависимость от периода колебаний;
- - зависимость от количества итераций.

Рис. 3.29. Зависимость относительного шага по времени от периода колебаний и количества итераций

плитуды колебаний.

Для схем Кранко-Николсона в качестве критерия гладкости решения использовалось неравенство

$$\left| \rho_{i+1}^j - 2\rho_i^j + \rho_{i-1}^j \right| \leq \lambda \left| \rho_i^j - \rho_{i-1}^j \right|, \quad (3.18)$$

где  $\lambda \approx 0.1$  - эмпирический коэффициент.

Эффективность решения задачи существенно зависит от вида используемой разностной схемы. Разностные схемы Кранко - Николсона, с учетом предложенной адаптации, позволяют достичь высокой точности решения, но имеют достаточно высокую операционную сложность (число элементарных арифметических операций, которые необходимо выполнить для реализации разностной схемы).

Усредненная относительная погрешность вычислительной схемы определяется по следующей формуле:

$$\xi(t) = \frac{\sum_{i=1}^k \left| \frac{\varphi_i(t) - \eta_i(t)}{\eta_i(t)} \right|}{k} \quad (3.19)$$

где  $\varphi_i(t)$  и  $\eta_i(t)$  - соответственно известное точное и приближенное значения решения в  $i$ -й точке;

$k$ -число моделируемых точек сеточной области.

## **4. ОПТИМИЗАЦИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ РЕЖИМОВ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

### **4.1 Общая схема оптимизации динамических процессов в режиме вынужденных колебаний**

При практическом использовании математических методов для решения задач оптимизации динамических процессов выделяют ряд последовательных этапов [3,64] (рис. 4.1):

- **Общий анализ задачи оптимизации.** Предполагает предварительный общий анализ задачи оптимизации с целью выяснения ее типа (статическая, динамическая, оптимальное управление) и т.д.
- **Определение критерия (или нескольких критериев) эффективности.** Выбором критерия оптимизации определяется основная цель функционирования динамического процесса.
- **Выбор управляемых переменных и анализ их влияния на критерий оптимизации.** Этап требует тщательного анализа и выявления возможного качественного влияния оптимизирующих или управляющих переменных на критерии оптимизации. Здесь важно, с одной стороны, учесть все существенные для оптимизации переменные, а с другой - исключить из рассмотрения несущественные переменные, мало влияющие на критерий оптимизации, так как сложность решения задачи в значительной степени определяется числом переменных, по которым производится оптимизация. Правильный учет всех требуемых ограничений на переменные системы обязателен, поскольку, как показывает опыт решения задачи оптимизации, по некоторым переменным оптимум часто находится на ограничении. Кроме того, при помощи проведенного анализа важно исключить все ограничения, которые заведомо не будут достигаться в оптимальном режиме.
- **Составление математической модели.** Происходит установление в математической форме связи критерия оптимизации с управляемыми переменными, а также математической трактовки всех имеющихся ограничений.

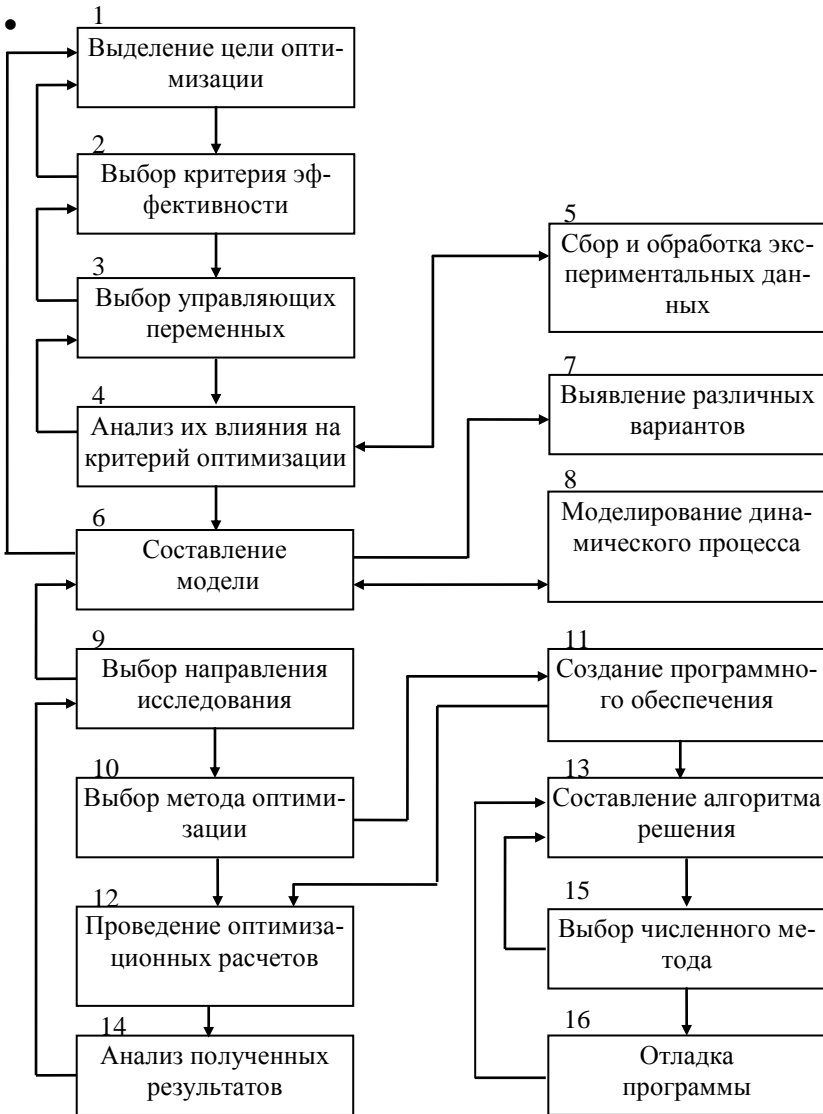


Рис. 4.1. Общие этапы оптимизации динамического процесса



Выбор оптимальной стратегии исследования. Этап наиболее важен для сложной системы, так как при оптимизации полный расчет и анализ функционирования системы (определение значений глобального критерия и значений функций, отвечающих ограничениям) приходится производить многократно.

- Выбор метода поиска экстремума критерия эффективности. Представляет собой математическую задачу нахождения экстремума глобального критерия в области изменений управляемых переменных, определяемой ограничениями системы.
- Проведение оптимального расчета и анализ полученных результатов.

Различаются следующие виды оптимизации динамических процессов:

- квазистатическая оптимизация - выбор наилучшего технологического режима. Такая оптимизация предполагает, что процесс находится в установившемся состоянии.
- динамическая оптимизация-оптимизация переходного процесса. Осуществляется оптимальным образом переход от одного стационарного состояния к другому.
- оптимизация колебательного процесса - выбор параметров периодического управления (амплитуды, частоты) при заданном законе изменения входных параметров (например, гармоническом). Процесс находится в установившемся периодическом режиме.
- оптимальное управление-выбор формы закона изменения, амплитуды, частоты входных параметров управления динамическим процессом.

Общая схема оптимизации динамического процесса в колебательном режиме представлена на рис. 4.2

Описание в монографиях (7,40,42,52,65,3,64,51,66) различных алгоритмов и подходов связано с тем, что многолетняя практика решения нелинейных задач оптимизации привела специалистов к достаточно единодушному мнению о невозможности создания универсального алгоритма, который бы одинаково успешно решил все задачи. Действительно, задачи нелинейной

0Π-

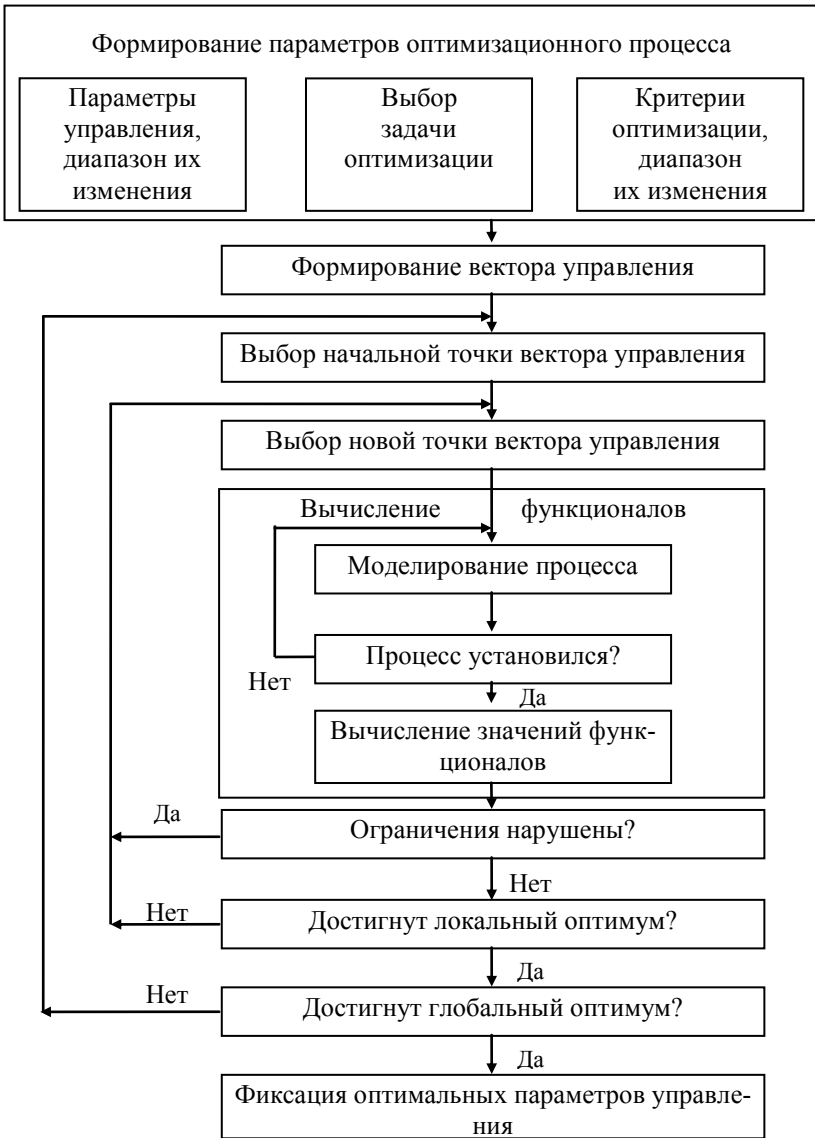


Рис. 4.2. Общая схема оптимизации динамического процесса в колебательном режиме

тимизации чрезвычайно разнообразны. Они отличаются структурой вхождения нелинейности, количеством переменных и ограничений, требуемым объемом памяти. И практический опыт показывает, что существуют классы задач, в которых, казалось бы, самый неэффективный с теоретической точки зрения метод благодаря простоте реализации и специфике задачи дает хорошие результаты. В связи с этим вычислительная практика в целом требует набора различных алгоритмов.

При решении задач нелинейного программирования широко применяются градиентные и поисковые методы [67,70]. Применение градиентных методов на практике может быть ограничено сложностью (или неточностью) получения производных. Метода поиска, хотя и медленно реализуются, на практике могут оказаться более удовлетворительными с точки зрения пользователя, чем градиентные метода, и решение задач с их помощью может обойтись дешевле при использовании современных вычислительных средств.

#### **4.2. Оптимизация процесса пиролиза бензина в колебательном режиме**

При эксплуатации промышленных пиролизных установок важной задачей является выбор оптимального режима термического разложения сырья различного состава, получение максимальной прибыли при заданной производительности по сырью и выработке целевых продуктов в условиях технологических ограничений [69].

В практической деятельности предприятий в некоторые периоды времени встречаются ситуации, когда необходимо максимизировать выход только одного товарного продукта (этилена, пропилена, фракции  $C_4$  при заданном количестве сырья).

В общем случае задача управления процессом пиролиза относится к классу динамических задач оптимизации объектов с распределенными параметрами. Такой характер задачи обусловлен процессами пуска и останова пиролизной печи и особенностями термических превращений в пирозмеевиках.

Пусть состояние процесса в каждый момент времени в

каждой точке  $l$  химического трубчатого реактора описывается вектор – функцией:

$$\varphi(l,t) = \{\varphi_1(l,t), \varphi_2(l,t), \dots, \varphi_k(l,t)\} \quad (4.1)$$

$$0 \leq l \leq L, \quad 0 \leq t \leq \tau$$

Эволюция состояния системы во времени и в пространстве определяется квазилинейной системой дифференциальных уравнений в частных производных вида [70]:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + A(\varphi, t, l) \frac{\partial \varphi}{\partial l} = f(\varphi, u, t, l) \quad \text{в} \quad D \times D_t \quad (4.2)$$

где  $f(\varphi, u, t, l) = \{f_1, f_2, \dots, f_k\}$  - заданная вектор - функция,

$u(t) = \{u_1, u_2, \dots, u_r\}$  - управление.

Ограничение на управление имеет вид  $u(t) \in U$  при всех  $t \in [0, \tau]$  (4.3)

Фактически эта область задается системой неравенств вида

$$U: \varphi_j(u) \leq 0, \quad j = \overline{1, J} \quad (4.4)$$

Условие (4.4) обычно отражает либо ограничения физического характера, либо ограничения технического порядка.

В дополнение к системе (4.2) задается набор краевых условий

$$\begin{aligned} \varphi &= \varphi^{\text{вх}} \quad \text{на} \quad \partial D \times D_t \\ \varphi &= \varphi^0 \quad \text{в} \quad D \quad \text{при} \quad t=0 \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$D = \{0 \leq l \leq L\}, \quad D_t = \{0 \leq t \leq \tau\}.$$

Качество того или иного управления системой оценивается набором числовых характеристик- функционалов

$$F_i[u(\bullet)], \quad i = \overline{0, 1, \dots, m} \quad (4.6)$$

(показатели качества, критерии качества и т.д.).

Задача квазистатической оптимизации формулируется следующим образом:

для заданных состава пиролизуемого сырья и интервала времени  $\tau$  найти такую вектор - функцию управления  $u^*(t)$ , при которой выполняется равенство

$$F^*[u^*(\bullet), \tau] = \max_{u(\bullet) \in U} F[u(\bullet), \tau] \quad (4.7)$$

Для процесса пиролиза бензина в состав вектора управления  $u$  в задаче квазистатической оптимизации входят следующие компоненты: массовый расход сырья  $G_c(t)$ , массовый расход пара  $G_n(t)$ , температура стенки змеевика на входе  $T_c^{ex}(t)$ , температура стенки змеевика на выходе  $T_c^{6blx}(t)$ , коэффициент наклона температурного профиля  $\alpha$ , температура сырья  $T^{ex}(t)$ ; векторами выходных координат процесса служат: температура смеси  $T(1,t)$ , давление смеси  $P(1,t)$ , концентрации компонент пиромеси  $C_i(1,t)$ ,  $i = \overline{1,6}$  (здесь  $i=1$  соответствует бензину, 2-этилену, 3-пропилену, 4-фракции C4, 5-сумме газообразных побочных продуктов, 6- сумме жидких побочных продуктов) по длине змеевиков печи, толщина слоя отложившегося кокса  $\delta(1,t)$ ; возмущающим воздействием является состав пиролизуемого сырья.

Основной целью решения задачи оптимизации процесса в колебательном режиме является получение периодических режимов, которые значительно повышали бы эффективность процесса по сравнению с оптимальными стационарными показателями.

Задача выбора оптимального установившегося колебательного режима заключается в том, чтобы выбрать такой закон изменения во времени режимных параметров и такой период  $T_p$ , чтобы, например, средняя производительность процесса  $P(\varphi, u)$  была максимальна

$$F = \frac{1}{T_p} \int_0^{T_p} P(\varphi, u) dt \rightarrow \max \quad (4.8)$$

Управление ищется в классе периодических функций

$$U(t+T_p) \approx U(t) \quad (4.9)$$

и входит в краевые условия (4.5).

Качество работы динамического объекта в колебательном режиме характеризуется набором критериев (показателей). В подобных ситуациях осуществляется «свертка» (преобразование) этих показателей к одному критерию, называемому основным, или основным критерием считается один из показателей, а

остальные полагаются равными (или не менее) некоторым данным величинам (плановым показателям).

#### 4.2.1 Критерии оптимизации процесса пиролиза в колебательном режиме

1) Прибыль за период колебаний

$$F_1 = \sum_{i=1}^6 \int_t^{t+T_p} A_i m_i C_i(L, t) dt / \sum_{i=1}^6 \int_t^{t+T_p} m_i C_i(L, t) dt \quad (4.10)$$

где  $A_i$  - заданные величины;  $m_i$  - молекулярная масса химических продуктов;  $G_c(t)$  - расход сырья,  $T_p$  - период колебаний.

2) Массовый выход этилена за период колебаний

$$F_2 = \frac{1}{T_p} \int_t^{t+T_p} C_2(L, t) G_c(t) dt. \quad (4.11)$$

3) Массовый выход пропилена за период колебаний

$$F_3 = \frac{1}{T_p} \int_t^{t+T_p} C_3(L, t) G_c(t) dt. \quad (4.12)$$

4) Массовый выход фракции C4 за период колебаний

$$F_4 = \frac{1}{T_p} \int_t^{t+T_p} C_4(L, t) G_c(t) dt. \quad (4.13)$$

5) В качестве показателя селективности процесса принят суммарный выход основных продуктов (этилена, пропилена, фракции C4) в массовых процентах на сырье за период колебаний.

$$F_5 = \sum_{i=2}^4 \int_t^{t+T_p} C_i(L, t) G_c(t) dt / \sum_{i=1}^6 \int_t^{t+T_p} C_i(L, t) G_c(t) dt. \quad (4.14)$$

Расход сырья за период колебаний является постоянной величиной

$$F_6 = \frac{1}{T_p} \int_t^{t+T_p} G_c(t) dt \equiv const.$$

#### 4.2.2. Задачи оптимизации процесса пиролиза в колебательном режиме

**Задача 1:** получение максимальной прибыли

$$F_1 \rightarrow \max$$

при выполнении ограничений по выпуску целевых компонентов

$$F_2 \geq F_2^z; F_3 \geq F_3^z; F_4 \geq F_4^z; F_5 \geq F_5^z.$$

и имеющемся ресурсе по сырью

$$F_6 = F_6^z$$

**Задача 2:** повышение селективности процесса

$$F_5 \rightarrow \max$$

при выполнении заданных ограничений

$$F_1 \geq F_1^z; F_2 \geq F_2^z; F_3 \geq F_3^z; F_4 \geq F_4^z.$$

**Задача 3:** максимализация выпуска одного из целевых продуктов (этилена, пропилена, фракции С4) при имеющемся ресурсе по сырью

$$F_k \rightarrow \max, k=2,3,4, \underline{\quad}$$

$$F_6 = F_6^z; F_n \geq F_n^z (n=1,5; n \neq k).$$

Здесь  $F_i^z$  ( $i=\overline{1,6}$ ) – заданные ограничения на функционалы.

Во всех задачах оптимизации ограничения на функционалы дополняются технологическими ограничениями на пиролизную установку:

$$G_c^{\min} \leq G_c(t) \leq G_c^{\max}$$

$$G_n^{\min} \leq G_n(t) \leq G_n^{\max} \tag{4.15}$$



$$T^{\min} \leq T(l, t) \leq T^{\max}$$

$$\delta(l, \tau) \leq \delta^{\max}$$

При заданном законе колебательного процесса на циклическую частоту и амплитуду колебаний также наложены ограничения:

$$\omega^{\min} \leq \omega \leq \omega^{\max} \quad (4.16)$$

$$AMP^{\min} \leq AMP \leq AMP^{\max}.$$

Порядок выбора оптимальных колебательных режимов пиролитической установки приведен на рис. 4.3.

После выбора одной из рассмотренных задач оптимизации и задания параметров оптимизационного процесса производится квазистатическая оптимизация и вычисляется показатель качества стационарного процесса, являющийся отправным при оценке эффективности колебательного режима. Затем выбирается допустимое управление колебательного процесса (расход сырья, входная температура сырья, состав сырья, давление);

задается закон изменения входных воздействий. Затем производится спектральный расчет в заданном диапазоне частот, выделяются локальные оптимумы, которые являются начальными приближениями для задачи оптимизации колебательного режима.

Задача оптимизации колебательного режима при заданном законе колебаний является задачей нелинейного программирования (параметры управления - циклическая частота и амплитуда, например, при гармонических колебаниях), с той особенностью, что для вычисления функционалов требуется установление колебательного режима (обычно несколько периодов колебаний в процессах, где период колебаний порядка времени пребывания смеси в реакторе). Параметры процесса и показатели качества колебательных режимов запоминаются в специализированной базе данных.

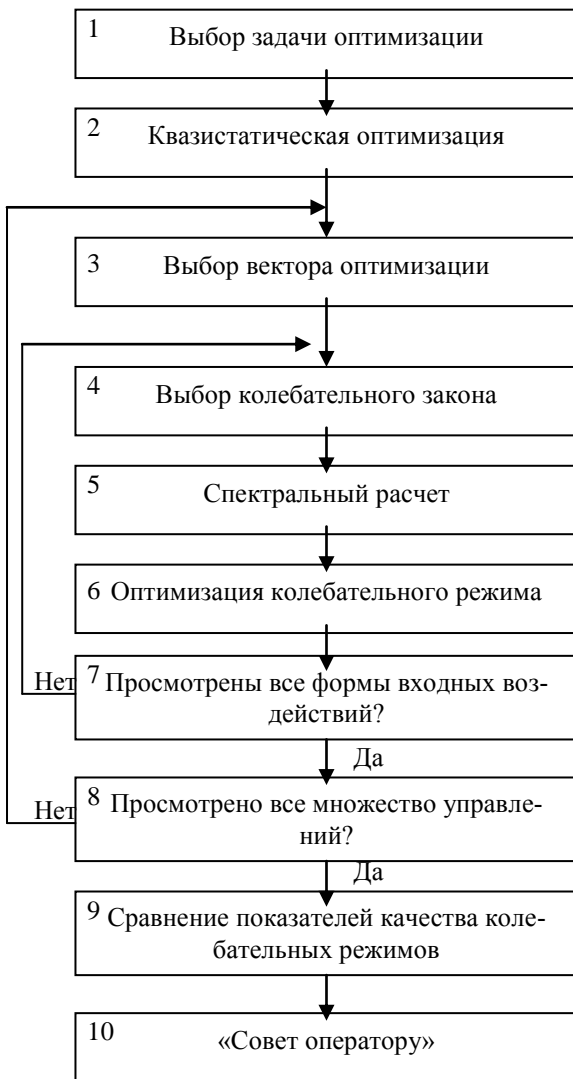


Рис.4.3. Порядок выбора оптимальных колебательных режимов работы пиролизной установки

Аналогичные расчеты производятся и для других форм колебаний. Затем выбирается новое допустимое управление и вычислительный цикл повторяется.

После проведения ряда расчетов происходит сравнение показателей качества колебательных режимов и выбирается из них максимальный (если задача максимизации) или минимальный (если задача минимизации). Затем производится оценка эффективности колебательного режима и выдается «совет оператору» о целесообразности перехода к колебательному режиму работы пиролизной установки.

Для оптимизации динамических процессов эволюционного типа применялись следующие вычислительные методы [71,66,67]:

- модифицированный метод Хука-Дживса;
- метод наискорейшего спуска;
- метод последовательной линеаризации;

Для задачи оптимального управления колебательным режимом наиболее целесообразно применять метод последовательной линеаризации (метод спуска в пространстве управлений [66]), который очень труден в практической реализации и применяется, в основном, для выбора начального температурного профиля процесса [71].

Применение метода наискорейшего спуска ограничено неточностью получения производных при моделировании работы реактора в режиме вынужденных колебаний.

Интерес представляет поисковый метод, разработанный на основе идей метода Хука-Дживса [67,68], применяемый как для квазистатической оптимизации, так и для оптимизации колебательного режима.

Информационная схема модифицированного метода Хука-Дживса приведена на рис. 4.4.

Предложенный метод не требует существования и нахождения функциональных производных. Поиск по этому методу состоит из последовательности шагов «исследующего поиска» вокруг базисной точки, за которой в случае успеха следует «поиск по образцу», то есть в направлении, выбранном для ми-

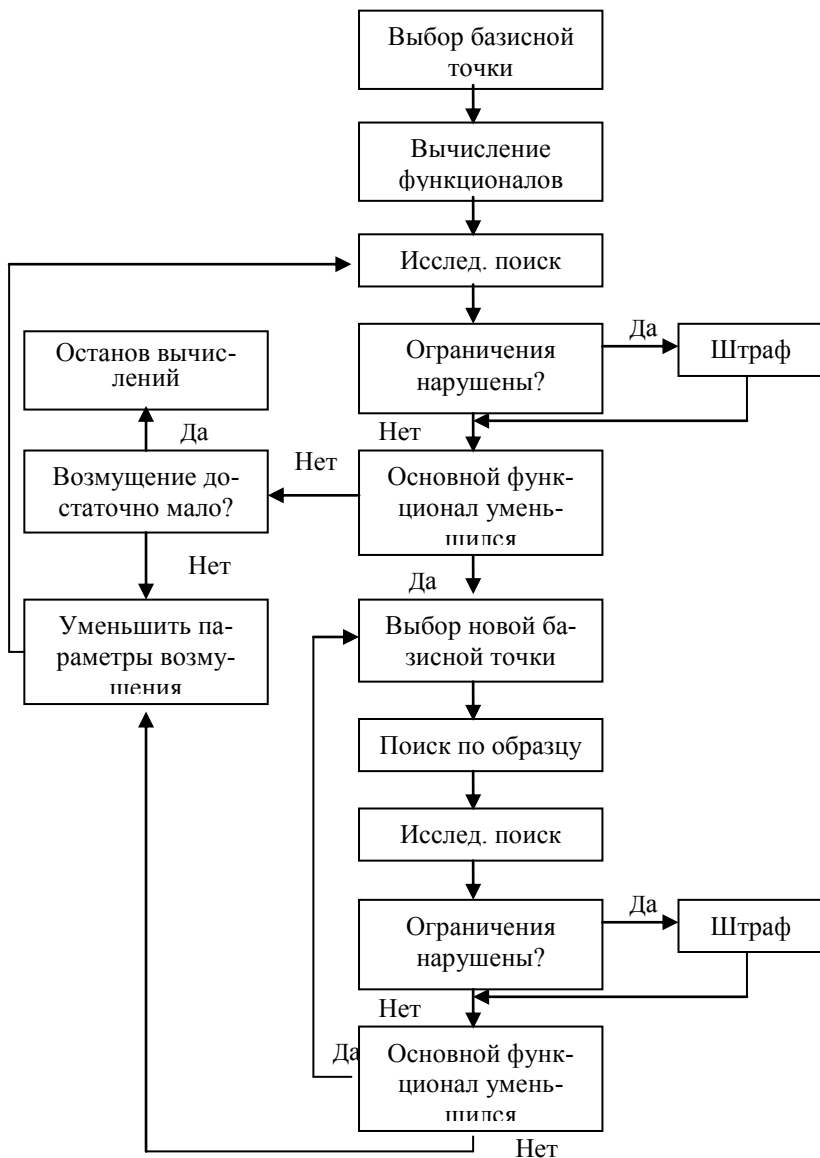


Рис. 4.4. Информационная схема модифицированного метода Хука-Дживса

нимизации. Учет ограничений происходит путем наложения штрафа (увеличение основного функционала) при выходе управляющих параметров за заданные ограничения. Параметры шага для каждой управляемой переменной регулируются отдельно.

Приведем пример оптимизации колебательного режима процесса пиролиза с использованием модифицированного метода Хука-Дживса. При начальных значениях параметров

$$G_c=2000 \text{ кг/ч}; T_c^{\text{вх}}=630 \text{ }^\circ\text{C}; T_c^{\text{вых}}=730 \text{ }^\circ\text{C}, \alpha=0,3$$

критерий качества, характеризующий прибыль в квазистатическом режиме, равен 0,0649032 (руб /кг).

Колебательный режим организуется периодическим изменением расхода паро- сырьевой смеси по синусоидальному закону с начальной циклической частотой  $\omega=12,56663$  (рад/с ) и начальной амплитудой волны  $AMP=10\%$  (по отношению к среднему расходу сырья).

Для точки приближенного максимума в задаче 1 оптимизации колебательного режима получены значения  $\omega=14,137$ ;

$AMP=5,25$ ; критерий качества за период колебаний равен 0,065869 (руб /кг)

Несмотря на то, что разработанный метод производит поиск локальных оптимумов и в отдельных случаях, может выдавать неверные решения (с соответствующим предупреждением), при правильном выборе начального приближения и верно заданных ограничениях метод устойчиво работает. Результаты, полученные с помощью данного метода, являются основой для разработки более эффективных, и, как правило, значительно более сложных методов оптимизации колебательных режимов распределенных процессов.

При решении задачи оптимизации может оказаться, что она не имеет решения (неправильно заданы величины ограничений). В этом случае производится вывод результатов последнего оптимизационного расчета и достигнутых ограничений с соответствующей диагностикой, на основании которых оператор принимает дальнейшее решение.

Для процессов с распределенными параметрами в настоя-

щее время отсутствуют качественные критерии целесообразности перехода к колебательному режиму (3). Поэтому для оценки эффективности колебательного режима вводится следующее соотношение

$$\Delta F^* = F_k^* - F_c^*.$$

Здесь  $F_k^*$  и  $F_c^*$  -максимальные значения критерия эффективности соответственно в колебательном и квазистатическом режимах. При выполнении соотношения

$$\Delta F^* \geq \varepsilon,$$

(где  $\varepsilon$ - заданная величина) колебательный режим считается эффективным.

Накопленный опыт показывает, что не существует универсального опыта решения задачи оптимизации колебательных процессов, многие методы не дают однозначного алгоритма в условиях появления локальных минимумов [3,72,73,74]. Поэтому система оптимизации построена как интерактивная, которая включает совместное применение ряда (от простых до очень сложных) оптимизационных методов и дает возможность использовать знания и многолетний опыт пользователя. Она постепенно развивается на основе практического применения и новых теоретических результатов [76].

## **5. ПРИМЕНЕНИЕ ИНТЕРАКТИВНЫХ СРЕДСТВ В ИНФОРМАЦИОННО-УПРАВЛЯЮЩИХ СИСТЕМАХ**

### **5.1. Интерактивные системы в составе информационно- управляющих систем (ИУС)**

#### **5.1.1. Введение нестационарных режимов для повышения эффективности динамических процессов**

В химической промышленности с каждым годом все большее значение приобретают исследования и моделирование нестационарных процессов, возникающих на всех масштабных уровнях организации процесса и реактора.

Химико-технологические системы на всех уровнях организации, начиная с молекулярного и до сложных реакционных узлов, обладают структурой и свойствами колебательных нелинейных систем. Они во многих случаях являются открытыми, нелинейными и имеют обратные связи достаточной силы.

При создании информационно-управляющих систем таким производством требуются всесторонние исследования технологических процессов, получение их характеристик, изучение и выбор оптимальных режимов, исследование различных вариантов алгоритмической реализации систем управления.

Если раньше стремились прежде всего отыскивать стационарные состояния, то сейчас интерес вызывает проблема вынужденной неустойчивости (с учетом ограничения на запас устойчивости) как источника интенсификации процессов массо- и теплообмена [1].

Пусть в искусственно создаваемом нестационарном, например периодическом, режиме средние значения указанных параметров равны соответственно значениям этих же параметров в стационарном режиме. Тогда при одинаковых средних величинах параметров, но разных законах изменения входных параметров во времени в нестационарном режиме возникают широкие возможности в формировании полей концентраций и температур в газовой фазе, в результате чего можно до-

биться более благоприятных, чем в стационарном режиме, условий осуществления процесса [2].

При переходе к периодическому (колебательному) режиму необходимо исследовать следующие вопросы [3]:

- существует ли устойчивый периодический режим;
- эффективен ли переход от оптимального статического режима к колебательному;
- каково возможное значение выигрыша в критерии оптимальности при таком переходе;
- каковы оптимальная форма изменения управляющих переменных, условия оптимальности;
- оценка сложности задачи и вычислительные алгоритмы решения;
- каковы зависимости, характеризующие связь между входными и выходными переменными в периодическом режиме - характеристики установившихся режимов;
- способы обеспечения устойчивости колебательных режимов.

### **5.1.2. Применение интерактивных систем для целей управления**

Включение интерактивных систем в состав информационно-управляющих систем оправдано тем, что учитывая сложность объектов управления в химической промышленности, поиск оптимальных режимов работы (в том числе и колебательных) представляет собой сложную задачу, разрешение которой практически невозможно без участия оператора-технолога.

Применение интерактивных систем в информационно-управляющих систем позволяет, с одной стороны, более интенсивно использовать вычислительную технику, современные математические методы для нахождения оптимальных колебательных режимов работы; а с другой стороны, дает возможность активно участвовать оператору в поиске и анализе управлений.

Структурная схема автоматизированного управления технологическим процессом, в этом случае, дополняется интерактивной системой управления (рис. 5.1). Интерактивная система



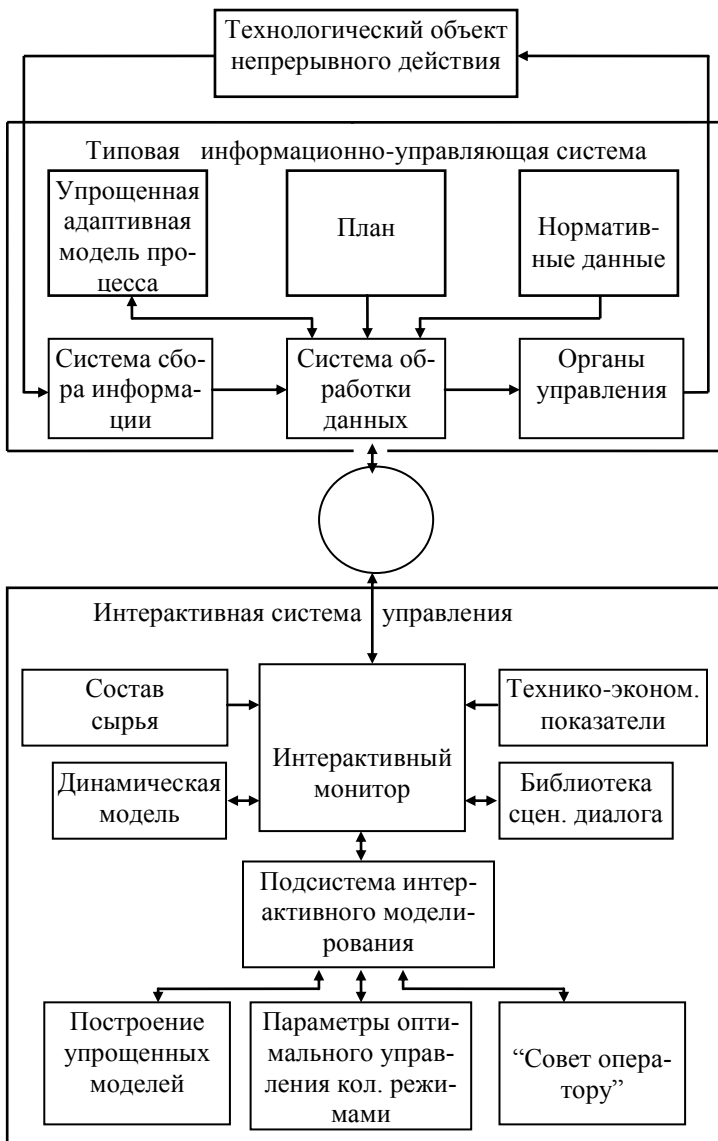


Рис.5.1. Структурная система автоматизированного управления технологическим процессом с использованием интерактивной системы

выступает в качестве информационно -советующей системы управления колебательными режимами химико-технологических процессов. Система интерактивного управления предлагает оператору рекомендации о целесообразности перехода к колебательным режимам, выдает параметры оптимальных колебательных воздействий. Система "замыкается" оператором, который принимает окончательное решение и реализует его.

Следует отметить, что в функции интерактивной системы не входит непосредственный сбор информации с объекта управления и непосредственное управление объектом; система, посредством интерактивного монитора, выступает в качестве "советчика оператору" в процессе принятия решений о переходе к колебательным режимам работы. Интерактивный монитор управляет работой системы в целом и, в зависимости от выбранного режима работы, инициирует определенный сценарий диалогового взаимодействия из библиотеки сценариев.

Результаты, получаемые с помощью интерактивных систем, использующих теоретические математические описания динамических процессов, являются важнейшим (а в ряде случаев и единственным) источником информации, которую исследователь использует (рис. 5.2):

- в процессе проектирования принципиально новых комплексов и технологий;
- в процессе оценки эффективности работы созданных технологических процессов;
- при разработке и создании эффективных автоматических и автоматизированных систем управления;
- при определении оптимальных законов управления разрабатываемыми и функционирующими объектами и технологическими процессами;
- при решении задач адаптивного регулирования по отношению к внешним и внутренним возмущениям;
- при исследовании влияния колебаний входных параметров на ход течения динамических процессов;
- при разработке гибких по сырью и выходным продуктам производственных систем;



Рис.5.2.Схема применений интерактивной системы в информационно-управляющей системе

для оценки целесообразности перехода к колебательным режимам;

- для обучения персонала управлению сложными химико-технологическими процессами и т. п.

Интерактивные системы управления динамическими процессами работают в режиме "совет оператору". Функциями управляющей вычислительной машины в этом случае являются сбор и переработка технологической информации, а также определение оптимальных управляющих колебательных воздействий, которые выдаются в качестве рекомендаций.

## **5.2. Анализ влияния колебаний входных параметров на ход течения сложных динамических процессов технологических объектов**

Имеются теоретические и экспериментальные работы, посвященные выявлению классов химических реакций на основе модельных кинетических схем, для которых доказывается возможность повышать эффективность динамических процессов, протекающих при периодически меняющихся управляющих параметрах.

В нестационарных условиях интенсифицируется тепло - и массообмен, повышается селективность, увеличивается выход целевых продуктов [4]. Известно, что нелинейные явления обуславливают эффективность применения вынужденных колебательных воздействий для интенсификации химико-технологических процессов.

В работе [5] рассмотрено действие внешних периодических возмущений на химические реакции, исходно находящиеся в стационарном состоянии или в колебательном режиме.

Периодическое возмущение потоков, концентрации и параметров среды, таких, как температура, широко изучалось с целью повышения выхода продукта, а в случае конкурентных реакций - избирательности продукта. Главные усилия в этом направлении были направлены на повышение среднего выхода химической реакции при периодическом управлении по сравнению со стационарным.

В других работах теория оптимального управления [6] бы-

ла использована для нахождения "наилучшего" периодического управления типа "Включено - Выключено", производящего переключение между двумя состояниями, которое оптимизирует критерий эффективности (им обычно является средняя по времени концентрация определенного продукта). Использовались и другие критерии, например, отношения усредненных по времени целевого и побочных продуктов [7].

Более поздние экспериментальные исследования продемонстрировали положительное влияние периодических возмущений на химические реакции в таких областях, как технология полимеров. В работе [8] путем проведения вычислительных экспериментов, показано, что переход к синусоидальным возмущениям концентрации катализатора на входе в реактор для непрерывного процесса безобрывной полимеризации позволяет изменять характеристики молекулярно -массового распределения полимера и, увеличивая амплитуду колебаний, можно получать такие же малые значения индекса полидисперсности в одном реакторе, как в третьем - четвертом реакторах каскада при обычном (стационарном) способе проведения процесса.

Теоретический анализ и экспериментальная проверка проведения каталитических процессов в нестационарных условиях (в том числе в условиях периодического изменения входных параметров) представлены в работах [9,10]. Основные преимущества нестационарного способа осуществления химических реакций в режиме периодического изменения направления подачи реакционной смеси в неподвижный слой катализатора заключаются в следующем [10].

Катализатор находится в нестационарном состоянии. Это при определенных условиях может повышать производительность и, что особенно важно, избирательность процесса по сравнению со стационарными условиями.

Для существующих стационарных режимов требуется стабилизация начального состава, температуры и нагрузки по исходной смеси, что приводит к созданию сложных систем автоматизированного управления процесса. Нестационарный способ позволяет перерабатывать реакционные газы как с постоянными, так и с переменными параметрами и не требует сложной аппа-

ратуры по автоматической стабилизации.

Ряд работ [11,12] свидетельствует о том, что в искусственно создаваемых нестационарных режимах многие физические и химические процессы можно проводить более интенсивно, чем в стационарном режиме. Перспективными оказались процессы, осуществляемые в режиме вынужденных колебаний входных параметров в трубчатых реакторах или с адиабатическими слоями катализатора. Как показывает анализ, для трубчатого реактора удастся сформировать поле температур, более близкое к изотермическому режиму по сравнению со стационарным режимом, что может привести к увеличению выхода целевых продуктов [11].

Изучено влияние периодического изменения состава исходного потока в реакторе смешения непрерывного действия [40]. На основе результатов моделирования и экспериментальных данных показано, что принудительные циклические изменения состава исходного потока вызывают значительное увеличение выхода промежуточного продукта реакции по сравнению с выходом при работе реактора в оптимальном установившемся состоянии. Установлено, что циклические колебания температуры оказывают меньшее влияние на изменение выхода промежуточного продукта.

В [3] изучены методы расчета оптимальных циклов и циклических режимов технологических процессов, позволяющих существенно повышать их эффективность, а в ряде случаев реализовать процессы, которые в статическом режиме нереализуемы.

Анализ результатов моделирования переходных процессов в магистральных газопроводах рассмотрен в работах [14,15], расчет нестационарных режимов магистральных газопроводов - в работе [15]. Вопросы управления сложными технологическими процессами, повышение экономичности энергетических установок в нестационарных условиях, анализ колебательной неустойчивости стационарных состояний приведены в работе [16].

Важное практическое значение имеют проблемы гашения пульсации потоков газа (жидкости, электричества или других физических субстанций) в длинных трубопроводах. Типичной проблемой подобного рода является проблема гашения пульса-

ции давления и расхода в трубопроводах газокomppressorных установок [17]. Необходимость гашения пульсации связана с повышенными потерями КПД газокomppressorных установок и наличием огромных трудностей, которые из-за пульсации возникают при наладке и эксплуатации этих установок.

Изложенный материал свидетельствует о том, что достаточно часто переход к искусственно создаваемым нестационарным режимам позволяет значительно повышать эффективность сложных динамических процессов. Один из важнейших факторов, обуславливающий эффективность, - динамические свойства процесса в целом. В нестационарных условиях гораздо сильнее, чем в стационарном, проявляется влияние процессов переноса вещества, тепла и импульса. С другой стороны, результатом анализа нестационарных режимов могут являться рекомендации для стабилизации параметров процесса. В любом случае анализ влияния периодических изменений входных параметров на ход течения сложных динамических процессов необходим.

В большинстве случаев возмущения создаются путем ступенчатого изменения концентрации реагентов на входе в реактор [18].

Актуальной на сегодняшний день является задача развития математической теории нестационарных процессов качественный и численный анализ математических моделей процессов, а также постановка и разработка теории оптимизации управления распределенных процессов в условиях периодического изменения входных параметров.

Чрезвычайное многообразие колебательных систем и их свойств требует при изучении протекающих в них колебательных процессов нахождения общих черт у различных колебательных систем и объединения их по наиболее характерным признакам в определенные классы и типы.

### **5.3. Классификация колебательных режимов динамических процессов в объектах управления**

Заменяя реальные динамические системы в объектах управления их соответственно выбранными моделями, проводит-

ся последовательная классификация систем и протекающих в них колебательных процессов по различным признакам [19]. Основа классификации колебательных систем - их динамические свойства. Важнейшим признаком колебательного движения является его периодичность. Для строго периодических процессов выполняется соотношение

$$F(t) - F(t+T) \equiv 0,$$

справедливая для любого момента времени -  $t$ , где  $T$  - период данного колебательного движения;  $1/T = f$  - частота (число периодов в единицу времени). Широко используется так называемая круговая частота  $\omega = 2\pi f$ . Особое значение имеет простейший вид колебательного процесса - гармоническое колебание

$$F(t) = A \sin(2\pi ft + \varphi_0) = A \sin(\omega t + \varphi_0).$$

Здесь  $A$  - амплитуда колебания,  $\omega t + \varphi_0$  - мгновенная фаза,  $\varphi_0$  - начальная фаза колебания. Гармонические колебания представляют собой интерес не только в силу простоты их аналитического представления, но в первую очередь потому, что эта форма движений наиболее часто встречается в реальных процессах. Периодические процессы иной формы (с другой зависимостью от времени) могут быть представлены как наложения нескольких гармонических колебаний.

В реальных колебательных системах условие периодичности выполняется приближенно, то есть можно положить в основу рассмотрения квазипериодические колебания, для которых

$$|F(t) - F(t+T(\varepsilon))| < \varepsilon,$$

где  $\varepsilon$  - любая наперед заданная малая величина и  $T(\varepsilon)$  почти период ( $T = 2\pi/\omega$ ).

Классификацию колебательных систем по их динамическим свойствам можно провести по ряду признаков (рис. 5.3):

- По источнику возмущений. Колебания организуются внешним источником или происходят за счет внутренних источников возмущения.



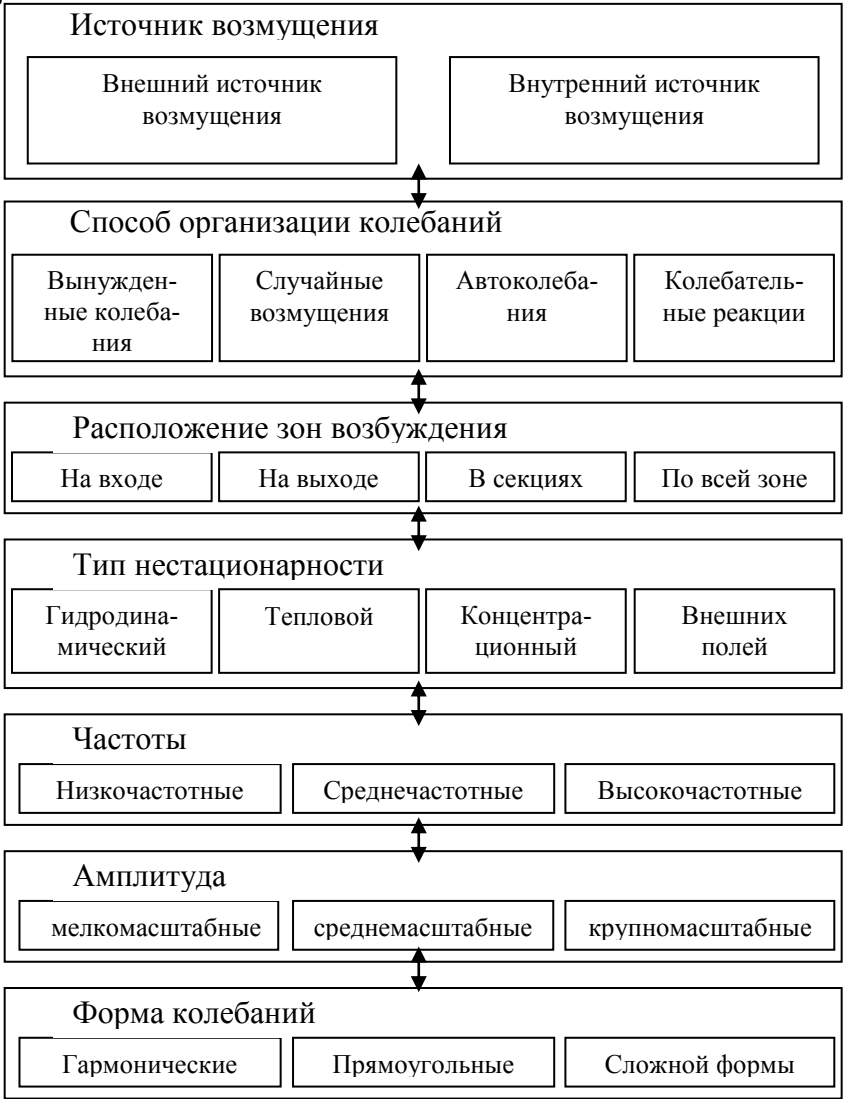


Рис.5.3. Классификация колебательных режимов

По способу организации колебаний. Различаются вынужденные колебания (за счет генераторов с внешним источником энергии), случайные возмущения (случайные помехи), автоколебания, колебательные реакции.

- По расположению зон возбуждения. Возбуждение может происходить на входе или на выходе аппарата (например, химического трубчатого реактора), в промежуточных звеньях аппарата (секциях, контактных устройствах); по всей зоне аппарата.
- По типу нестационарности различают следующие уровни: гидродинамический, тепловой, концентрационный (изменение концентраций химических реагентов), внешних силовых полей (электрических, магнитных и др.).
- По частоте (циклическом изменении управляющих воздействий) колебания различаются как низкочастотные ( $f < 50$  Гц), среднечастотные ( $50 \text{ Гц} < f < 200 \text{ Гц}$ ) и высокочастотные ( $f > 200 \text{ Гц}$ ).
- По амплитуде выделены мелкомасштабные (до 10 % от стационарного), среднемасштабные (10-50 %) и крупномасштабные (свыше 50 %) колебания.
- По форме выделяются гармонические, прямоугольные и сложной формы колебания.

В работе произведено последовательное и обоснованное рассмотрение динамических систем эволюционного типа, имеющих важное значение в химии и технике, с использованием в каждом отдельном случае наиболее адекватных данной задаче методов анализа и расчета.

#### **5.4. Управление процессами эволюционного типа в условиях периодического изменения входных параметров**

Динамические системы, в которых существуют колебательные процессы, называют колебательными системами [19]. Большинство динамических процессов описывается нелинейными уравнениями и лишь в первом приближении (при малых зна-

чениях параметров, малых отклонениях от равновесия и др.) эти уравнения можно заменить линейными.

В различных отраслях промышленности получили широкое распространение пространственно-распределенные процессы, динамическое поведение которых описывается системами дифференциальных уравнений в частных производных эволюционного типа. Важнейшими из таких процессов являются процесс пиролиза углеводородов и процесс регенерации неподвижного слоя катализатора, широко представленные в промышленности синтетического каучука (полимерных материалов).

При расчетах химических реакторов до недавнего времени ограничивались исследованиями их стационарных режимов. Однако на практике технологический процесс никогда не протекает в стабильных условиях, и в ходе его непрерывно возникают всевозможные возмущающие воздействия [1,24].

При периодически изменяющихся во времени входных параметрах (начальной температуре, составе исходной реакционной смеси, нагрузке) в реакторе устанавливается вполне определенный квазипериодический режим.

Стационарный режим, надежная стабилизация которого кажется, на первый взгляд, залогом высокой эффективности промышленного процесса, является лишь частным случаем нестационарного режима [25].

### **5.5. Методы исследования динамических систем в колебательном режиме**

Используемые в настоящее время теоретические методы исследования динамических систем условно можно разделить на классы: точные, асимптотические, численные, численно - аналитические, приближенные [26]. При решении конкретных задач нередко приходится использовать сочетание нескольких методов различных классов.

Точные методы, в которых в процессе решения не допускается какое-либо упрощение исходной задачи, применяют преимущественно для решения некоторых линейных задач, описываемых уравнениями в частных производных.

В подавляющем большинстве динамических задач не удастся получить точные аналитические решения. Основные причины, затрудняющие получение точных решений, обусловлены, как правило, нелинейностью уравнений, зависимостью коэффициентов уравнений от координат и т.п.

Строгое математическое обоснование асимптотических методов (методов возмущений) в настоящее время развито достаточно. Однако непротиворечивость результатов и имеющийся огромный опыт практического применения этих методов дают основание считать их наиболее общими из всех существующих аналитических методов [27,28].

Получающиеся при использовании методов возмущений асимптотические ряды очень часто расходятся или крайне медленно сходятся. Кроме того, как правило, удается вычислить лишь несколько (обычно не более двух или трех) первых членов возмущенного разложения. Указанные обстоятельства не позволяют оценить поведение решения при промежуточных (конечных) значениях параметра или координаты и накладывают существенные ограничения на использование асимптотических формул для расчетов непосредственно в инженерной практике.

Неудобство прямого использования результатов асимптотического анализа непосредственно в инженерной практике в значительной мере может быть преодолено путем применения численных методов с использованием ПК. Эти методы основаны на замене любых дифференциальных соотношений соответствующими приближенными конечно-разностными аппроксимациями, что позволяет для решения уравнений в частных производных использовать различные численные алгоритмы. Точность и скорость вычислительного процесса зависят от способа аппроксимации дифференциальных величин; от способа выбора, геометрии и плотности системы дискретных точек, в которых вычисляются искомые величины и их производные; от способа организации численного алгоритма [29,31,32,46].

Численные методы обладают большой универсальностью и позволяют эффективно получать решения различного рода задач для промежуточных значений параметра и координаты, то есть в той области, где не могут быть использованы асимптотические

методы.

Один из наиболее существенных недостатков численных методов состоит в том, что для гарантированной уверенности в адекватности и точности результатов численного расчета искомого решению в случае достаточно сложной задачи вычисления следует проводить сразу по нескольким различным схемам. Такое дублирование часто необходимо даже тогда, когда первое из полученных численных решений приводит к внешне разумным и хорошо интерпретируемым результатам.

Несмотря на указанные недостатки, численные методы в настоящее время играют определяющую роль в развитии научно-технического прогресса, являясь основным аппаратом исследования технических задач, связанных в первую очередь с проектированием, оптимизацией, управлением технологических процессов.

Одним из наиболее распространенных методов при современном изучении решений нелинейных систем, включая и периодические, являются численно - аналитические методы [33]. На их основании с помощью специальных итерационных схем удается получать аналитическое представление решений линейной и нелинейной систем, представленных, в основном, в виде обыкновенных дифференциальных уравнений.

Приближенные методы необходимы и очень удобны для получения достаточно грубых оценок на предварительном этапе любого исследования. Приближенные методы нередко играют большую роль в формировании качественного понимания того или иного явления или процесса.

Использование аналитических методов эффективно для предсказания поведения систем при малых и больших амплитудах периодического изменения входных параметров. В зависимости от величины амплитуды воздействия и относительной частоты воздействия применяются аналитические методы, дающие приближенные решения для периодически возмущенных систем: метод возмущения, когда амплитуда возмущения велика или мала, либо метод разделения масштабов времени, когда частота возмущения велика или мала по сравнению с временем релаксации невозмущенной динамической системы. Таким

образом, для анализа динамических процессов, протекающих в условиях периодического изменения входных параметров со средними величинами амплитуды и частоты, в настоящее время применимы только численные методы.

## **5.6. Интерактивные средства моделирования при проектировании систем управления**

Эффективность функционирования разрабатываемых систем управления динамическими процессами во многом определяется оптимальностью ее структуры, включающей комплекс технических средств, информационное и программное обеспечение, а также адекватностью алгоритмического обеспечения функции объекта управления. Все это выдвигает на первое место проблемы автоматизации проектирования как систем управления в целом, так и отдельных ее составляющих. В ряде работ отражена методология автоматизации проектирования систем управления, например [81,82]. Однако развитие проблемно-ориентированных программных средств автоматизации проектирования систем управления значительно отстает от общеметодологических разработок [83].

Использование автоматизированных методов проектирования предполагает применение для этих целей метода моделирования на ПК. Системы моделирования используются в процессе автоматизированного проектирования систем управления динамических процессов для анализа характеристик альтернативных вариантов построения [87].

Рассмотрим возможности применения интерактивных средств моделирования динамических процессов, ориентированных на решение задач проектирования информационно-управляющих систем.

### **5.6.1. Задача выбора эффективной системы управления динамическими процессами**

Широко распространены системы управления динамическими процессами (например, процессом пиролиза бензина [84]),

работающие в режиме "совет оператору". Функциями управляющей вычислительной машины являются сбор и переработка технологической информации, а также определение оптимальных управляющих воздействий, которые выдаются в качестве рекомендаций управленческому персоналу. Задачей последнего являются критический анализ, корректировка и реализация оптимальных управлений на объекте.

Современные системы управления динамическими процессами имеют двухуровневую иерархическую структуру [84]. На верхнем уровне с помощью адаптивной математической модели процесса на управляющей вычислительной машине (УВМ) периодически находятся оптимальные значения режимных переменных. Полученные значения передаются затем в качестве заданий на локальные автоматические системы регулирования (АСР), образующие нижний уровень системы управления. Задачей АСР является реализация оптимальных режимов, т.е. поддержание заданных значений режимных переменных процесса.

При построении локальных АСР и выборе параметров их настройки необходимо знание динамических свойств объекта, которые определяются с помощью динамической модели путем исследования реакции объекта на различные возмущающие воздействия. Полученные по модели кривые переходных функций используются при расчете параметров настроек локальных АСР.

Варианты систем управления сравниваются по результатам анализа переходных процессов выходных переменных при воздействии различных возмущений.

Математическая модель динамического процесса может быть представлена в виде оператора, ставящего в соответствие вектору управления  $U$  и вектору возмущений  $Z$ , вектор выходных переменных  $Y$  [84,65,69]:

$$Y=F(U,Z) \quad (5.1)$$

Вектор управлений  $U$  и вектор возмущений  $Z$  образуют вектор входных переменных  $X$ .

В процессе функционирования объекта и системы управления должны выполняться плановые технико-экономические показатели на качество, количество и себестоимость выпускаемой продукции.

При этом должны выполняться технологические ограничения:

$$K_i(X, Y) \geq 0, \quad i = \overline{1, I} \quad (5.2)$$

Выполнение ограничений (5.2) обеспечивается системой управления  $A$ , которая определяется как оператор, ставящий в соответствие векторам  $Z$  и  $Y$  вектор управления  $U$ :

$$U = A(Z, Y). \quad (5.3)$$

При разработке системы управления накладываются ограничения на затраты и время проектирования, срок окупаемости системы и другие. Эти ограничения записываются в виде:

$$R_m(c, a) \geq 0, \quad m = \overline{1, M}, \quad (5.4)$$

где  $C$  - вектор показателей качества проекта. Система управления  $a$  называется допустимой, если выполняются ограничения (5.2) и (5.4). Сравнение вариантов допустимых систем управления проводится при помощи некоторого показателя  $J(a)$ , характеризующего эффективность работы системы  $a$ .

Задача оптимального выбора системы управления заключается в разработке такой системы  $a^*$ , которая обеспечивает выполнение ограничений (5.2), (5.4) и максимизирует показатель эффективности  $J(a)$  системы  $a$

$$J(a^*) = \max_{a \in U} J(a). \quad (5.5)$$

Здесь под множеством  $U$  понимается совокупность систем управления, для которых выполняются ограничения (5.2), (5.4).

На рис. 5.4 приведена укрупненная схема последовательности работ при проектировании систем управления динамическими процессами.

### **5.7. Принятие решений при переходе к колебательным режимам в пиролизных процессах**

Учитывая сложность в надежном обеспечении современных пиролизных установок (мощностью 300-500 тыс. тонн в год) однородным сырьем, в настоящее время наметилась тен-





Рис. 5.4. Схема последовательности разработки систем управления динамическими процессами

денция проектировать и строить различные установки, которые могут перерабатывать различное сырье в зависимости от его наличия и стоимости, а также с учетом сезонных изменений состава сырья. Полная гибкость по сырью, то есть способность перерабатывать все употребляющиеся виды сырья пиролиза- от этана

до газойлей, признана экономически нецелесообразной [85]. Поэтому оптимальным пределом гибкости считают гибкость по отношению лишь к двум видам сырья. Такие установки могут перерабатывать полностью одно из двух видов сырья или одновременно оба вида в любых соотношениях.

В связи с возросшими требованиями к выработке пропилена, целесообразно создавать новые установки пиролиза гибкими не только по сырью, но и по получаемым продуктам, то есть гибкими по жесткости пиролиза.

Кроме гибкости по сырью и получаемым продуктам важное значение имеют исследования новых возможностей управления пиролизными установками. В условиях периодического изменения входных параметров (начальной температуре, составе исходной реакционной смеси, нагрузке) в трубчатом реакторе при пиролизе углеводов устанавливается режим, который может обеспечивать повышение производительности пиролизной установки и улучшение качественного состава получаемого целевого продукта.

Для обеспечения максимального выхода ценных продуктов в современных трубчатых печах, необходимо [46,85,86]:

- сохранять минимальное время контакта в печи (0,1-0,3 с.);
- вести процесс в области максимально возможных температур;
- поддерживать минимальное парциальное давление углеводов в зоне высокотемпературного нагрева;
- обеспечить оптимальное условие подвода тепла по длине змеевика;
- добиваться минимального коксообразования на стенках змеевиков;
- добиваться максимальной селективности процесса;

- обеспечить (наряду с максимальным получением этилена) растущий спрос на пропилен, бутadiен, ароматические углеводороды и другие ценные продукты;
- стремиться к максимальному увеличению единичной мощности трубчатой печи;
- обеспечить максимальную гибкость конструкции печи, позволяющей перерабатывать разнообразное сырье.

Необходимо отметить, что некоторые из изложенных требований являются взаимно исключающими. Так, для производства максимального количества олефинов требуется короткое время контакта, а выход ароматических соединений возрастает с увеличением времени контакта и парциального давления паров сырья. Для выбранного сырья основным требованием является обеспечение высокой селективности его переработки, то есть максимальное производство олефинов и ароматических углеводородов и минимальное образование метана.

Отсюда видно, насколько актуальной становится задача разработки математических моделей и программных средств для управления процессом пиролиза с учетом гибкости по сырью и получаемым продуктам [87]. Кроме того необходимо предусмотреть переход от стационарного режима работы химического трубчатого реактора к колебательному (например, в условиях периодического изменения входных параметров).

Для указанных выше целей использована разработанная проблемно -ориентированная интерактивная система моделирования и оптимизации. Интерактивная система может входить в качестве функциональной подсистемы в информационно-управляющую систему процессом пиролиза углеводородов (см. рис. 5.5).

В зависимости от целей исследования, состава сырья, а также входных параметров процесса, производится коррекция математической модели. Моделирование и оптимизация динамических процессов производится с использованием приближенных методов. Реализация колебательных режимов организуется периодическим изменением входных параметров (расхода и входной температуры сырья, состава исходной реакционной смеси и др.) процесса во времени в соответствии с заданным за-

коном (синусоидальная, прямоугольная или треугольная волна).

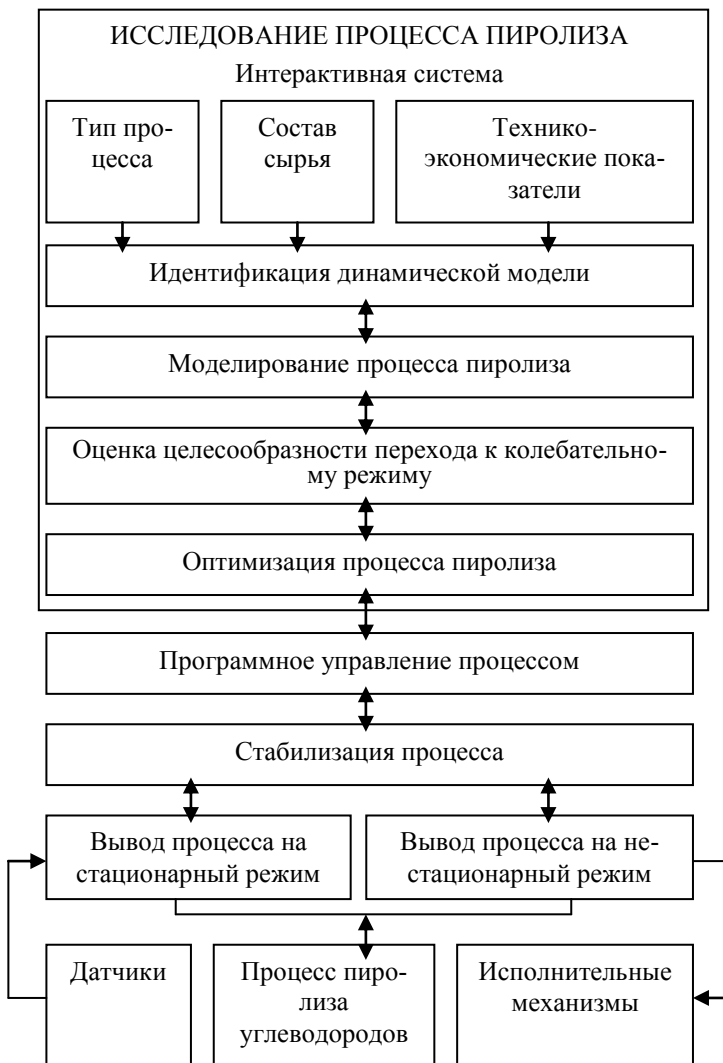


Рис.5.5. Функциональные подсистемы информационно-управляющей системы процесса пиролиза углеводов

Предусмотрен ввод более сложных форм колебаний посредством специализированного экранного редактора. При этом средние значения указанных параметров равны соответственно значениям этих же параметров в стационарном режиме.

Моделирование установившихся колебательных режимов производится с использованием полной динамической модели, представленной в виде системы (2.1)-(2.12).

Различаются следующие задачи оптимизации пиролизной установки:

- задача минимизации расхода сырья и топлива на установку при ограничениях на выпуск целевых продуктов;
- получение максимальной прибыли при заданной производительности по сырью и выработке целевых продуктов;
- максимизация выпуска одного из целевых продуктов (этилена, пропилена, фракции С4) при имеющемся ресурсе по сырью.

Рассчитанные оптимальные параметры управления отображаются на экране дисплея. Результаты вычислений могут быть представлены графически и выведены на печать. Оператор оценивает представленные результаты и выдает команду на реализацию выбранного оптимального режима работы пиролизной установки; или инициирует повторный цикл расчетов, предварительно изменив условия и параметры оптимизации.

Процесс принятия решения о переходе к колебательным режимам работы пиролизной установки производится в несколько этапов (с использованием интерактивной системы):

задается тип процесса (статический, колебательный); указывается состав сырья (в допустимых пределах); задаются технико-экономические показатели (показатель качества и ограничения на выпуск целевых и побочных продуктов); осуществляется идентификация модели; производится моделирование процесса на основе полной динамической модели. Осуществляется расчет показателя качества в стационарном режиме. При моделировании колебательного процесса осуществляется спектральный расчет (ведется расчет в заданной диапазоне циклической частоты колебаний). Производится оптимизация колебательного режима работы реактора. Целесообразность перехода к ко-

лебательному режиму определяется из условия: если усредненный показатель качества за период при определенной циклической частоте и амплитуде (из заданных диапазонов) колебаний входных параметров больше показателя качества стационарного процесса на 1-2 %.

С учетом сложности динамического объекта, найденные оптимальные режимы работы нуждаются в дополнительном анализе со стороны управленческого персонала, который способен учитывать дополнительные факторы и в той или иной мере "отфильтровывать" управление. Подобная двойная "фильтрация" всех возможных управлений позволяет снизить требования к надежности технических средств систем управления.

Использование интерактивных систем в информационно-управляющих системах позволяет, с одной стороны, более интенсивно использовать вычислительную технику, современных математических методов для обработки информации, нахождения оптимальных режимов работы; а с другой стороны, в активном участии оператора в поиске и анализе управлений.

Переход от статического режима к периодическому установившемуся связан с усложнением аппаратуры, генерирующей периодические управляющие воздействия, и с изменением систем стабилизации.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Учитывая, что всестороннее экспериментальное изучение динамических свойств сложных нестационарных объектов с распределенными параметрами, в условиях действующих производств не представляется возможным, математическое моделирование является одним из важнейших методов исследования таких систем.

Трудно переоценить значение качественного анализа построенных математических моделей, особенно в условиях периодических изменений входных параметров. К сожалению, сегодня нет эффективных методов расчета оптимальных колебательных режимов для систем нелинейных дифференциальных уравнений с частными производными. Поэтому чаще всего приходится численно решать такие задачи, основываясь на предыдущем опыте, интуиции.

Моделирование во всей полноте может осуществляться с помощью интерактивной системы - программного комплекса, обеспечивающего проведение вычислительного эксперимента.

В наибольшей степени для исследования технологических процессов пригодны интерактивные системы, позволяющие использовать опыт и интуицию пользователя.

Разработанная проблемно-ориентированная интерактивная система, в качестве математической модели в которой используется система эволюционного типа, построена на основе современных принципов разработки программного обеспечения и оказалась эффективной для исследования нестационарных процессов в технологических системах.

Улучшение эргономических показателей общения пользователя с системой достигнуто за счет развитых средств диалога.

Система интерактивного моделирования и оптимизации в совокупности с набором баз данных образуют замкнутую систему исследования влияния колебаний входных параметров на ход течения сложных технологических процессов эволюционного типа.

Учитывая сложность объектов управления в химической промышленности, поиск оптимальных нестационарных режимов представляет собой сложную задачу, для разрешения кото-



рой используются интерактивные системы управления, позволяющие оператору-технологу активно участвовать в войне и анализе управлений. Система интерактивного управления предлагает оператору рекомендации о целесообразности перехода к колебательным режимам, выдает параметры оптимальных колебательных воздействий. Система "замыкается" оператором, который принимает окончательное решение и реализует его.

Анализ влияния колебаний входных параметров на ход сложных технологических процессов показал, что в режиме вынужденных колебаний возможно значительное повышение эффективности динамических процессов. С другой стороны результатом анализа колебательных режимов могут являться рекомендации для стабилизации параметров процесса. И в том, и в другом случае анализ влияния периодических изменений входных параметров на ход сложных динамических процессов является необходимым.

Проведенная классификация колебательных систем по их динамическим свойствам выявила, что в наименьшей степени исследованы конечные колебания входных параметров со средними величинами амплитуды и частоты. Для анализа таких систем, представленных в виде детерминированных математических моделей эволюционного типа, в настоящее время применимы только численные методы. Поэтому в основу исследования динамических систем (в условиях периодического изменения входных параметров) положен вычислительный эксперимент с широким использованием современных численных методов.

Проведение вычислительных экспериментов во всей полноте осуществляется с помощью проблемно-ориентированной интерактивной системы. Результаты, получаемые с помощью интерактивных систем, использующих полные математические описания динамических процессов, являются важнейшим источником информации, которую исследователь использует в процессе проектирования принципиально новых компонентов и технологий; при определении оптимальных законов управления разрабатываемыми и функционирующими объектами и технологическими процессами; при решении задач адаптивного регулирования по отношению к внешним и внутренним возмущениям;

при разработке гибких по сырью и выходным продуктам производственных систем; для оценки целесообразности и принятия решения при переходе к колебательным режимам и т. п.

В качестве математической модели динамического процесса выбрана система квазилинейных дифференциальных уравнений в частных производных эволюционного типа. Важнейшие из динамических систем эволюционного типа являются системы, описывающие процесс пиролиза углеводородов и процесс регенерации неподвижного слоя катализатора, широко представленные в промышленности полимерных материалов.

Для процессов пиролиза и регенерации приведены математические описания, основанные на законах сохранения массы, энергии и количества движения, отражающие основные статические и динамические характеристики исследуемых объектов.

Разработана общая система и адаптивные разностные схемы для численного моделирования эволюционных систем в условиях колебанных входных параметров; и на ее основе проведено численное моделирование процессов пиролиза бензина и регенерации неподвижного слоя катализатора, численное моделирование процесса пиролиза бензина в условиях периодического изменения входных параметров показало, что колебание входной температуры сырья приводит к уменьшению принятого показателя эффективности процесса; колебание расхода сырья при определенных режимах работы пиролизной печи может привести к положительному эффекту, выраженному в повышении производительности пиролизной установки и улучшению качественного состава получаемых целевых продуктов.

В процессе регенерации горение кокса протекает в ярко выраженной зоне, которая перемещается вдоль слоя катализатора в направлении движения газового потока с непрерывным возрастанием температуры, что может привести к порче катализатора.

Предложена схема интерактивной оптимизации динамических процессов эволюционного типа в колебательном режиме. Разработан порядок выбора оптимальных колебательных режимов пиролизной установки. Для процесса пиролиза бензина проведена оптимизация колебательного режима.

Задача адаптации методов оптимизации к анализу колебательных режимов химико - технологических процессов решается с помощью таких математических и вычислительных средств, как итерационные методы, обогащенные возможностями учета от шага к шагу эволюции всей системы данных об объекте.

Результаты проведенных расчетов колебательных режимов работы реакторов могут быть использованы для целей оптимального их конструирования, выбора оптимальных режимов работы, выбора и расчета систем автоматического управления.

В работе сформулированы требования и основные этапы разработки интерактивных систем. Разработана проблемно-ориентированная система моделирования и оптимизации, позволяющая исследовать динамические процессы в колебательном режиме и выдавать рекомендации для их оптимизации. Показаны возможности применения интерактивных систем для выбора эффективной системы управления. Интерактивная система, входящая в состав информационно-советующей подсистемы в управлении процессом пиролиза углеводородов, применима для оценки целесообразности перехода к колебательным режимам и выступает в качестве "советчика" оператору.

Созданная проблемно-ориентированная интерактивная система моделирования и оптимизации применима для

- оценки эффективности созданных технологических процессов;
- проектирования новых технологических установок;
- проектирования систем управления динамических процессов;
- оценки целесообразности перехода к колебательным режимам в динамических процессах эволюционного типа;

Разработанная система моделирования позволяет исследовать динамические процессы в трубчатых реакторах с изменяющейся геометрией змеевиков, исследовать сложные колебательные режимы (многочастотные колебания) и т.д. Интерес представляют исследования колебательных режимов различных динамических процессов: неустановившегося движения газа (жидкости) в трубопроводах; движения контейнерного пневмотранспорта; движения автомобилей на скоростной автостраде,

движения крови по сосудам и др.

Основная идея - использовать интерактивный режим - оказалась эффективной. При решении задач пользователь применяет свои знания и опыт, а интерактивная система выступает как вычислитель: предлагает первоначальные решения поставленных задач, предупреждает о соблюдении ограничений, быстро оценивает предлагаемые пользователем решения и т.д.

Дальнейшее развитие интерактивной системы возможно не только путем расширения ее вычислительных и графических возможностей, расширения круга решаемых задач, но и путем интеллектуализации интерактивной системы, то есть разработки

- интеллектуального обеспечения общения разработчика с системой (интеллектуальный пользовательский интерфейс);
- экспертной системы поддержки принятия решений; и др.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Слинко М.Г. Проблемы развития математического моделирования химических процессов и реакторов, // Теор. основы хим. технологии. -1987, N2.
2. Валко П., Матрос Ю.Ш. Периодическое управление на входе адиабатического поля катализатора // Теор. основы хим. технологии. -1982. -С. 33-37.
3. Цирлин А.М. Оптимальные циклы и циклические режимы. -М.: Энергоатомиздат, 1985. -264 с.
4. Матрос В.Ш. // Кинетика и катализ. -1981. -N 2. -С. 505-512.
5. Ремус П., Росс Дж. Химические системы под действием периодического возмущения //Колебания и бегущие волны в химических системах: Пер. с англ. -М.: Мир, 1988. -С. 319-364.
6. Matsubara M., Nishimura Y., Takahashi N. Periodic Operation OF CSTR I. Idealized Santrol //Shem. Eng. Sci. -1973. -N 28. -P. 1369.
7. Цирлин А. М., Балакирев В. С., Дудников Е. Г. Вариационные методы оптимизации управляемых объектов. -М.: Энергия, 1976.
8. Подвальный С.Л. Моделирование промышленных процессов полимеризации. -М.: Химия, 1979. -256 с.
9. Боресков Г. К. Катализ. Вопросы теории и практики //Избранные труды. -Новосибирск: Наука, 1987. -536 с.
10. Матрос Ю.Ш. Каталитические процессы в нестационарных условиях. -Новосибирск: Наука, 1987. -229 с.
11. Матрос Ю.Ш. Перспективы использования нестационарных процессов в каталитических реакторах // ВХО. -1977. -Т. 22.-С. 576-580.
12. Фарлоу С. Уравнения с частными производными для научных работников и инженеров: Пер. с англ. -М.:Мир, 1985. - 384 с.
13. Lee S.K., Yeund S.Y., Bailey I.E. Experimental studies of a consecutive - competitive reaction in steady state and forced periodic CSTRs. Con. //J. Chem. ENG. -1980, 58. -N 2 -P 212-218.

14. Брянских В.Е., Кулик М.Н., Пухов Г.Б. Моделирование нестационарных режимов магистральных газопроводов методами повышенной точности // Электронное моделирование. – 1984. -Т. 6. N3. -С. 61-65.
15. Кулик М.И., Матвеев С. В. Математическая модель и алгоритм анализа нестационарных режимов магистральных газопроводов // Электронное моделирование. -1985. -Т. 7, N -С. 3-11.
16. Лукьянов А. Т. Некоторые вопросы математического моделирования задач теории горения // Электронное моделирование. -1986. -Т. 8. N 4. -С. 95-100.
17. Бутковский А. Г. Методы управления системами с распределенными параметрами. -М.: Наука, 1975.
18. Ильина З. П., Тимошенко В. И., Слинко М.Г., Полотнок О. Я. Исследование кинетики реакции окисления нафталина в нестационарных условиях. // Докл. АН СССР. -1980. -Т. 255, N 3. -С. 628-631.
19. Основы теории колебаний/ В. В. Мигулин, В. И. Медведев, Е.Р. Мустель, В.Н. Парыгин; Под ред В.В. Мигулина. -М.: Наука, Гл. ред. физ. мат. лит., 1988.
20. Воеводин А.Ф., Шугрин С.М. Численные методы расчета одномерных систем. -Новосибирск: Наука, 1981. –205 с.
21. Неизотермическое течение газа в трубах./ О.Ф. Васильев, Э.А. Бондарев, А.Ф. Воеводин, М.А. Каниболотский - Новосибирск: Наука, 1978.
22. Лурье М.В., Гольсберг В.И. Расчет гидродинамических процессов движения в системах контейнерного пневмотранспорта //Иzv. АН СССР. Энергетика и транспорт. -1971, N 4.-С. 99-104.
23. Численные методы в динамике жидкостей: Пер. с англ. /Э. Джеймсон, Т. Мюллер, У. Боллхауз и др. -М.: Мир, 1981.
24. Матрос Ю.Ш. Разработка реакторов с неподвижным слоем катализатора // Математическое моделирование химических реакторов. "Новосибирск, 1984. -С. 6-25.
25. Матрос Ю.Ш. Нестационарные процессы в каталитических реакторах. -Новосибирск; Наука, 1980.

26. Методы модельных уравнений и аналогий в химической технологии /В. В. Дильман, А.Д. Поллиик. -М.: Химия, 1988.-304 с.
27. Митропольский Ю.А., Мартынюк Д.И. Периодические и квазипериодические колебания систем с запаздыванием. - Киев. Вища шк., 1976. -590с.
28. Митропольский О. А., Мосеенкоз Б. И. Асимптотические решения уравнений в частных производных. –Киев: Вища шк., 1976. -590с.
29. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. - М.: Наука, 1980.
30. Марчук Г.И. Методы расщепления. -М.: Наука, 1988. - 264 с.
31. Самарский А. А. Теория разностных схем, -М.: Наука, 1983.
32. Самарский А. А., Попов В.Л. Разностные схемы газовой динамики. -М.: Наука, 1975.
33. Численно-аналитические методы исследования решений краевых задач/ А.М. Самойленко, Н.И. Ронто -Киев: Наук. думка, 1985. –224с.
34. Подвальный С.Л., Барабанов Б.Ф. Численное моделирование процесса пиролиза бензина. -Воронеж, 1988. –17 с. -Деп. в ВИНТИ, N 58-ХП88.
35. Афанасьев В.Н., Колмаковский В. Б., Носов В.Р. Математическая теория конструирования систем управления. - М.: Высш. шк., 1989. –477 с.
36. Математическое моделирование. Нелинейные дифференциальные уравнения математической физики. - М.: Наука, 1987.
37. Романов А.Н., Жабеев В.П. Имитаторы и тренажеры в системах отладки АСУТП. -М: Энергоатомиздат, 1987. –112 с.
38. Самарский А. А. Современные проблемы математической физики и вычислительной математики. -М.: Наука, 1982.-С. 332.
39. Самарский А. А., Попов Ю.П. Вычислительный эксперимент.-М.: Знание, 1983.

40. Балакирев В.С., Володин В. М., Цирлин А.М. Оптимальное управление процессами химической технологии (Экстремальные задачи в АСУ). -М.: Химия, 1978. –383 с.
41. Барабанов В.Ф. Интерактивные средства моделирования динамических систем// Технология компьютерного обучения.-Воронеж: ВПИ. 1988. -С. 124-128.
42. Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. -М.: Химия, 1985. –448 с.
43. Бодров В. И., Муромцев В.Л. Математическая модель динамики химического трубчатого реактора // Теор. основы хим. технологии. -1979. –N 6. -С. 859.
44. Бодров В.И., Муромцев В.Л., Шамкин В.Н. Математическая модель динамики процесса пиролиза ацетона // Теор. основы хим. технологии. -1985. –N 3. -С. 336.
45. Справочник проектировщика АСУТП / Г.Л. Смилянский, Л.З. Амликский, В. Я. Баранов и др; Под редакцией Г.Л. Смилянского. -М.: Машиностроение, 1983. -527 с,
46. Тучинский М.Р. Родных Ю.В. Автоматизированные системы управления производством олефинов. -М.: Химия, 1985. – 304 с.
47. Автоматизированная система управления крупнотоннажным производством этилена/ Под ред. Ю.М. Корова.- М.: Химия, 1986.
48. Маслов В.П., Данилов В.Г, Волосов К. А. Математическое моделирование процессов теплопереноса. Эволюция дисси-паривных структур. -М.: Наука, Гл. ред. физ.- мат. лит., 1987. -352 с.
49. Павленко В. Г. Основы механики жидкости. -Л.: Судостроение, 1988. –240 с.
50. Тучинский М.Р., Родных Ю.В. Математическое моделирование и оптимизация пиролизных установок. -М.: Химия, 1979.
51. Задорожний В. Г., Ульянова Е.Л., Родных Ю.В. Оптимизация процесса пиролиза бензина// Дифференциальные уравнения и их приложения. –Воронеж: ВГУ, 1985. -С. 25-32.



52. Подвальный С. Л., Барабанов В.Ф, Моделирование периодического управления расходом сырья процесса пиролиза углеводородов. -Воронеж, 1988. –13 с. -Деп. в ВИНТИ, N 57-ХП88.

53. Лойцянский Л.Г, Механика жидкости и газа. -М.: Наука, Гл. ред. физ. мат. лит., 1987. –840 с.

54. Ландау Л. Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Т. Гидродинамика. -М.: Наука, 1988. -736 с.

55. Современная гидродинамика. Успехи и проблемы: Пер с англ. /Дж. Бэтчелор, Г. Моффат, Ф. Сэффлин и др; Под ред. Дж. Бэтчелора и Г. Моффата. -М.: Мир, 1884. –501 с.

56. Гуцин В. А., Коньдин В.Н.. Численное моделирование волновых движений жидкости. - ВЦ АН СССР, М., 1985.

57. Колебания и бегущие волны в химических системах: Пер. с англ. /Под ред. Р. Филда, М. Супрер. -М.: Мир, 1988.-720 с.

58. Буянов Р. А. Закоксование и регенерация катализаторов дегидрирования при получении мономеров СК.-Новосибирск: Наука, 1968.

59. Хоров Ю.М. Моделирование физико- химических процессов нефтепереработки и нефтехимии. -М.: Химия, 1978.

60. Фокин О. В., Острер Л. А., Воров Ю.М. Расчет и оптимизация режима неизотермической регенерации неподвижного слоя катализатора. // Теор. основы хим. технолог. -1987. –N 5. -С. 618-628.

61. Подвальный С.Л., Барабанов В.Ф. Моделирование нестационарного процесса пиролиза углеводородов// Модели и алгоритмы оптимизации в автоматизированных системах. - Воронеж, 1989. -С. 94-98.

62. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. - М.: Наука, 1989. –432 с.

63. Белоцерковский О. М. Численное моделирование в механике сплошных сред.- М.:Наука, Гл. ред. физ. мат. лит., 1984.

64. Кафаров В.В., Мешалкин В.Г., Гурьева Л.В. Оптимизация теплообменных процессов и систем. -М.: Энергоатомиздат, 1988.

65. Бодров В. И., Вильский Е.Г. Оптимизация процесса пиролиза с использованием нестационарной математической модели // Теор. основы хим. технол. -1977. –N 45. -С. 750-756.
66. Федоренко Р.П. Приближенное решение задач оптимального управления. -М.: Наука, 1978. –448 с.
67. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование: Пер. с англ. -М.: Мир, 1975. –535 с.
68. Банди Б. Методы оптимизации. Вводный курс: Пер. с англ. -М.: Радио и связь, 1988. –128 с.
69. Бодров В. И., Вильский Е.Г., Матвейкин В. Г. Алгоритм управления пиролизом газообразных углеводородов в трубчатой печи с учетом нестационарности процесса // Химическая промышленность. -1979. –N 4. -С. 46-48.
70. Годунов С. К. Уравнения математической физики. -М.: Наука, 1979. –392 с.
71. Федоренко Р.П., Черных И. К., Барабанов В.Ф. О приближенном решении задач оптимального управления реакторами адиабатического типа, работающими в периодическом режиме // I Всесоюзная конференция "Динамика процессов и аппаратов химической технологии": Тез. докл. -Воронеж, 1982. -С. 79.
72. Валко Г., Матрос Ю.Ш. Периодическое управление температурой на входе адиабатического слоя катализатора// ТОХТ.-1982. –N 1. -С. 33-37.
73. Оптимальное периодическое управление температурой на входе адиабатического слоя катализатора / А.М. Ахметзянов, В.А. Кузин, Ю.Ш. Матрос, А.С. Носков // ТОХТ. -1986.-N 5, -С. 626-632.
74. Черноусько А.М., Акуленко Л.Д., Соколов Б.Н. Управление колебаниями. -М.: Наука, 1980. –384 с.
75. Методы и средства автоматизированного расчета химико-технологических систем/ Н.В. Кузичкин, С.Н. Саутин, А.Е. Лунин и др. -Л.: Химия, 1987.
76. Норенков И.П., Маничев В. Б. Системы автоматизированного проектирования электронной и вычислительной аппаратуры.-М.: Высш. школа, 1983. –272 с.

77. Карпов В.Я., Корягин Д.А., Самарский А.А. Принципы разработки пакетов прикладных программ для задач математической физики //ЖВМ и МФ -1978. –N 2. -С. 458-467.

78. Подход к построению базы данных по физическим параметрам. / О.К. Войцеховская, В.С. Макушкин, А.В. Розина, Н.Б. Яковлев // Программирование. –1987. N 6. -С. 35-39.

79. Барабанов В.Ф., Подвальный С.Л., Черных И. К. Численное моделирование процесса регенерации неподвижного слоя катализатора. -Воронеж, 1989. –15 с. -Деп. ЦОСИФ ЦНИИТ Энефтехима, N 59-НХ89.

80. Подвальный С.Л., Барабанов В.Ф. Интерактивные средства моделирования при проектировании АСУ динамическими процессами. -Воронеж, 1988. -18с. -Деп. в ВИНТИ, N 6876- В88

81. Техника проектирования систем автоматизации технологических процессов: Справочное пособие / Под ред. Л.И. Шипетина. –М.: Машиностроение,1976.

82. Шимерин Д.Г. Мясников В. А. Автоматизированные и автоматические системы управления. –М.: Энергия ,1979.

83. Фролов В.Н., Львович Я.Е., Подвальный С.Л. Проблема оптимального выбора в прикладных задачах. –Воронеж: Изд. ВГУ, 1980-140с.

84. Бодров В.И., Муромцев Ю.Л, Шамкин В.Н. Выбор эффективной системы управления печами пиролиза с учетом множества состояний функционирования // Теор. основы хим. технологии. –М. -1987., -С. 530-538.

85. Пиролиз углеводородного сырья / Т.Н. Мухина, Н.Л. Барабанов, С.Е. Бабаш и др. -М.: Химия, 1987.

86. Черный И. Р. Производство сырья для нефтехимических синтезов. -М.:Химия, 1983. –336 с.

87. Автоматизированное проектирование систем управления /Под ред. М. Джамшиди и др. -М.: Машиностроение, 1989.-344 с.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	.
<b>1. РАЗРАБОТКА ИНТЕРАКТИВНЫХ СИСТЕМ</b>	.
1.1. Требования и основные этапы разработки интерактивных систем.....	.
1.2. Система интерактивного моделирования и оптимизации технологических процессов .....	.
1.2.1. Организация работы компонентов системы	.
<b>2. ПОСТРОЕНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ЭВОЛЮЦИОННЫХ СИСТЕМ</b>	.
2.1. Общие подходы к построению математических моделей эволюционных систем.....	.
2.1.1. Общие требования к построению математических моделей динамических процессов.....	.
2.1.2. Этапы построения математических моделей динамических систем эволюционного типа.....	.
2.2. Полная динамическая модель процесса пиролиза углеводов .....	.
2.3. Математическая модель процесса регенерации неподвижного слоя катализатора.....	.
2.4. Особенности моделирования динамических процессов в условиях периодического изменения входных параметров.....	.

### **3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМ ЭВОЛЮЦИОННОГО ТИПА**

3.1. Общая схема численного моделирования динамических систем.....	.
3.2. Численное моделирование процесса пиролиза бензина .....	.
3.2.1. Результаты численного моделирования процесса пиролиза бензина.....	.
3.2.1.1. Численное моделирование процесса пиролиза бензина в условиях периодического изменения входных параметров.....	.
3.3. Численное моделирование процесса регенерации неподвижного слоя катализатора.....	.
3.3.1. Результаты численного моделирования процесса регенерации.....	.
3.4. Адаптация разностных схем для численного моделирования колебательных динамических процессов.....	.

### **4. ОПТИМИЗАЦИЯ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ РЕЖИМОВ ДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ.....**

4.1. Общая схема оптимизации динамических процессов в режиме вынужденных колебаний.....	.
4.2. Оптимизация процесса пиролиза бензина в колебательном режиме.....	.
4.2.1. Критерии оптимизации процесса пиролиза в колебательном режиме.....	.
4.2.2. Задачи оптимизации процесса пиролиза в колебательном режиме.....	.

## 5. ПРИМЕНЕНИЕ ИНТЕРАКТИВНЫХ СРЕДСТВ В ИНФОРМАЦИОННО - УПРАВЛЯЮЩИХ СИСТЕМАХ

5.1 Интерактивные системы в составе информаци-  
онно-управляющих систем.....

5.1.1. Введение нестационарных режимов для по-  
вышения эффективности динамических процессов.

5.1.2. Применение интерактивных систем для це-  
лей управления.....

5.2. Анализ влияния колебаний входных парамет-  
ров на ход течения сложных динамических процессов  
технологических объектов.....

5.3. Классификация колебательных режимов ди-  
намических процессов в объектах управления.....

5.4. Управление процессами эволюционного типа  
в условиях периодического изменения входных па-  
раметров.....

5.5. Методы исследования динамических систем в  
колебательном режиме.....

5.6. Интерактивные средства моделирования  
при проектировании систем управления.....

5.6.1. Задача выбора эффективной системы  
управления динамическими процессами.....

5.7. Принятие решений при переходе к ко-  
лебательным режимам в пиролизных процессах.

Заключение.....

Список литературы.....

Научное издание

БАРАБАНОВ Владимир Федорович  
ПОДВАЛЬНЫЙ Семен Леонидович

ИНТЕРАКТИВНЫЕ СРЕДСТВА  
МОДЕЛИРОВАНИЯ  
СЛОЖНЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ  
ПРОЦЕССОВ

Редактор В.П. Селигеева

ЛР №066815 от 25.08.99. Подписано в печать 16.08.2000  
Формат 60 x 84 / 16. Усл. печ. л. 6,8  
Уч.-изд. л. 6,6 . Тираж 150 экз. Заказ № 287 ”С” 72.

Издательство  
Воронежского государственного  
технического университета

394026 Воронеж, Московский просп., 14