

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего
образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Методические указания

*Для практических занятий
по дисциплине*

*Математические и компьютерные методы в химии и химической
технологии*

для студентов направления подготовки
18.03.01 Химическая технология
Направленность Химический инжиниринг и цифровые технологии

Ставрополь 2026

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	4
1. Основные понятия и общая характеристика химико-технологических систем	5
1.1. Понятие химико-технологической системы	5
1.2. Химическое предприятие как сложная кибернетическая система	6
1.3. Классификация моделей ХТС	7
1.4. Характеристика технологических операторов. Понятие технологической топологии ХТС	9
1.5. Виды технологических связей между операторами	15
1.6. Постановка задач анализа и синтеза ХТС	20
2. Расчет материально-энергетических балансов химико-технологических систем	22
2.1. Общий вид системы уравнений балансов	22
2.2. Совместность и обусловленность систем уравнений балансов ХТС	25
2.3. Методы решения систем уравнений балансов ХТС	25
2.3.1. Прямые методы решения систем линейных алгебраических уравнений	26
2.3.2. Итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений	28
2.3.3. Системы нелинейных уравнений	31
2.4. Общая методика составления и решения систем уравнений балансов ХТС	34
3. Определение степеней свободы химико-технологических систем	42
3.1. Понятие степени свободы ХТС	42
3.2. Регламентированные и оптимизирующие проектные переменные ХТС	42
3.3. Определение числа степеней свободы ХТС	43
3.4. Информационные потоки ХТС и их структура	44
4. Математические модели технологических операторов	45
4.1. Формы представления символических математических моделей технологических операторов ХТС	45
4.2. Матрицы преобразования технологических операторов	47
4.3. Матричный и детерминантный методы анализа химико-технологических систем	49
5. Топологический метод анализа и топологические модели химико-технологических систем	51
5.1. Основные понятия и определения теории графов	52
5.2. Характеристика и принципы построения топологических моделей ХТС	55
6. Задания для самостоятельной работы	60
Вопросы для самоконтроля	75
Список литературы	76

Введение

Моделирование - один из главных методов, позволяющих ускорить технический прогресс, сократить сроки освоения новых процессов.

Современное химическое производство представляет собой сложную химико-технологическую систему (ХТС), состоящую из большого количества аппаратов и технологических связей между ними. Разработка и эксплуатация производства – ХТС – требует знания как общего подхода к проблеме, так и большого количества вопросов, непосредственно связанных с ХТС.

При разработке новой ХТС или модернизации существующей, основная задача заключается в создании высокоэффективного химического производства, т.е. такого объекта химической промышленности, который позволит получать продукцию заданного качества в требуемом объеме наиболее экономически целесообразным путем. При эксплуатации существующей ХТС необходимо таким образом управлять производством, чтобы при высокой производительности и низких капитальных и текущих затратах обеспечить получение продукта требуемого качества. Кроме того, при эксплуатации ХТС необходимо не только понимать принципы организации и функционирования производства, заложенные в технологическую схему при ее проектировании, но и учитывать колебания на рынке сырья и продукции, изменения параметров сырья, требования к конечной продукции, а также непрерывное изменение параметров работы оборудования вследствие непрерывного расходования его ресурсов, возможных аварий, пусков, остановок и т. д.

При рассмотрении любой ХТС всегда обнаруживается функциональная взаимосвязь аппаратов. Так, например, в ХТС, включающей реактор и аппарат разделения, реактор, который обеспечивает высокую степень превращения исходных продуктов, облегчает работу аппарата разделения. Однако работа реактора с низкой степенью превращения в ХТС может быть компенсирована за счет интенсификации процесса выделения целевого продукта. Следовательно, существует компромиссный вариант в выборе оборудования и режимов работы аппаратов ХТС.

Ключом к решению перечисленных задач является применение научно обоснованной теории анализа и синтеза химико-технологических систем.

Основной научный метод исследования ХТС – математическое моделирование, аппарат - теория систем и ее прикладная часть – системный анализ (совокупность методов и средств изучения сложных систем).

1. Основные понятия и общая характеристика химико-технологических систем

1.1. Понятие химико-технологической системы

Химико-технологическая система (ХТС) – это совокупность взаимосвязанных технологическими потоками и действующих как единое целое аппаратов, в которых осуществляется определенная последовательность технологических операций (подготовка сырья, собственно химическое превращение и выделение целевых продуктов).

Элемент ХТС – это аппарат, в котором протекает типовой химико-технологический процесс. При исследовании ХТС внутренние свойства и структура элемента не являются предметом изучения, а анализируются только такие существенные свойства элемента, которые определяют его взаимодействие с другими элементами ХТС или влияют на свойства системы в целом.

Процесс функционирования ХТС рассматривают как последовательную смену состояний системы в некотором интервале времени. Состояние ХТС определяется набором выходных переменных системы.

Входными переменными ХТС являются физические параметры входных потоков сырья и исходных продуктов, а также параметры различных физико-химических воздействий окружающей среды на процесс функционирования ХТС (температура, давление, влажность и т.п.).

Выходными переменными ХТС служат физические параметры материальных и энергетических потоков химических продуктов на выходе ХТС. Эти параметры подразделяют на параметры состояния (массовый расход, концентрации химических компонентов, давление, температура, энтальпия и т.д.) и параметры свойств потоков (теплоемкость, вязкость, плотность и т.д.). Состояние системы зависит от параметров ХТС, параметров технологического режима элементов и от воздействия на ХТС входных материальных и энергетических потоков сырья или исходных продуктов.

Параметры ХТС и параметры технологических режимов элементов обуславливают характер процесса функционирования системы, т.е. некоторый закон изменения состояний системы.

Параметры ХТС подразделяют на конструкционные и технологические. Конструкционными параметрами ХТС являются геометрические характеристики аппаратного оформления элементов системы (объем химического реактора, основной размер сечения аппарата, диаметр и высота слоя насадки в массообменных аппаратах и т.д.). К технологическим параметрам ХТС относятся коэффициенты степеней превращения и степеней разделения химических компонентов, коэффициенты тепло- и массопередачи, константы скоростей химических реакций и т.д.

Параметрами технологического режима элементов ХТС называют совокупность основных факторов (параметров) внутри элемента (температура, давление, применение и активность катализатора, условия гидродинамического перемещения потоков компонентов), которые влияют на скорость технологического процесса, выход и качество химических продуктов. Качество функционирования ХТС определяют при помощи показателей эффективности, под которыми понимают числовые характеристики системы, оценивающие степень приспособления системы к выполнению поставленных перед ней задач.

Любая совокупность элементов данной ХТС может рассматриваться как ее *подсистема*, которая, как правило, является некоторой самостоятельно функционирующей частью системы. Правильное выделение подсистем в сложной ХТС способствует облегчению решения задач исследования системы в целом.

ХТС, которые соответствуют химическим производствам и технологическим цехам химических предприятий, свойственны все характерные признаки больших или сложных систем. В сложных ХТС важную роль играют вопросы автоматического управления процессом функционирования системы. Управлением называют процесс сбора, передачи и переработки информации, реализуемый специальными средствами – системами автоматического управления (САУ) или управляющими устройствами.

В общем случае управление процессом функционирования сложных ХТС осуществляют на двух уровнях – технологическом и организационном. Каждое химическое производство или технологический цех, а также химическое предприятие в целом представляют собой совокупность двух подсистем – ХТС и САУ, которые действуют совместно как одна сложная кибернетическая система, обеспечивающая в результате своего функционирования получение требуемых продуктов и полупродуктов.

1.2. Химическое предприятие как сложная кибернетическая система

Современное химическое предприятие можно подразделить на взаимосвязанные подсистемы, соподчинение между которыми увязывается иерархической структурой, состоящей из трех-четырех уровней иерархии.

1 степень иерархии – типовые химико-технологические процессы (механические, тепловые, диффузионные, химические) и локальные системы стабилизации;

2 степень иерархии – ХТС, соответствующие технологическим цехам или участкам, САУ процессами организационного и технологического функционирования цехов или участков и САУ ХТС;

3 ступень иерархии – сложные ХТС, отвечающие химическим производствам целевых или промежуточных продуктов, и САУ организационного и технологического функционирования производств;

4 ступень иерархии – химическое предприятие в целом и автоматизированная информационная система организационного управления предприятием.

Целью функционирования отдельных элементов ХТС является определенное физико-химическое воздействие на технологические потоки с высокой производительностью и интенсивностью.

Основные показатели эффективности функционирования элементов ХТС выражают в виде коэффициентов полезного действия элементов или величин, характеризующих фактический выход химического продукта из элемента ХТС, которые для технологических процессов собственно химического превращения представляют собой степени превращения химических компонентов, а для технологических процессов межфазной массопередачи - степени межфазного перехода (степени разделения) или коэффициенты извлечения.

Цель функционирования технологических цехов и отдельных химических производств заключается в производстве установленного количества некоторого целевого химического продукта или промежуточного продукта заданного качества.

Показателями эффективности функционирования технологических цехов и отдельных химических производств являются расходные нормы по сырью, топливу, электроэнергии, греющему пару и охлаждающей воде в натуральных единицах (например, в тоннах сырья на единицу продукции). Чем ближе расходные коэффициенты к стехиометрическим, тем лучше его экономические показатели.

Цель функционирования химического предприятия, представляющего собой совокупность химических производств состоит в выполнении производственного плана по выпуску заданного ассортимента химической продукции в соответствии с требованиями стандартов и технических условий. Эффективность функционирования химического предприятия определяется экономическими показателями.

1.3. Классификация моделей ХТС

Успешное решение задач исследования ХТС на стадии их проектирования и эксплуатации предполагает наличие математической модели ХТС. Характер технологических задач, решаемых на каждой иерархической ступени химического предприятия, определяет вид математической модели, используемой для исследования функционирования этих степеней.

Модель сложной ХТС всегда должна быть некоторым компромиссом между достаточной простотой представления процессов функционирования моделируемой системы и сложными эффектами, существенными для функционирования реальной системы. Модель, включающая представление всех характеристик и особенностей, теоретически присущих данной реальной системе, называется *изоморфной* моделью.

Сложные системы изучаются с помощью *неизоморфных* или *гомоморфных* моделей, которые несколько упрощенно отражают наиболее существенные характеристики процесса функционирования системы. Одним из основных вопросов является выбор уровня приближения к действительности, при котором еще можно достигнуть достоверных результатов.

При изучении ХТС применяют гомоморфные модели двух классов: обобщенные и математические.

Обобщенные модели – это качественные модели, используемые для получения общего представления о процессе функционирования об элементах и о химическом составе исходного сырья, промежуточных и конечных продуктов ХТС. Обобщенные модели могут быть двух типов: иконографические и операционно-описательные модели.

Иконографические обобщенные модели дают общее представление об исследуемой ХТС в виде некоторого графического изображения или чертежа.

Операционно-описательные модели дают общее упрощенное представление о процессе функционирования ХТС в форме последовательного словесного описания различных химико-технологических процессов, происходящих в элементах системы. Примером операционно-описательных моделей могут служить технологические регламенты и различная проектно-эксплуатационная документация.

Математическая модель ХТС является абстрактным и формальным представлением системы, изучение которого возможно математическими методами. Математические модели (ММ) ХТС подразделяют на символические и иконографические.

Символические математические модели реальной ХТС представляют собой совокупность математических соотношений в виде формул, уравнений, операторов, логических условий или неравенств, которые определяют характеристики состояния ХТС в зависимости от конструктивных и технологических параметров ХТС.

Иконографические математические модели ХТС – это графическое отображение таких качественных свойств ХТС, по которым можно определить количественные характеристики системы, или графическое отображение функциональных соотношений между параметрами и переменными ХТС, являющихся по своей сущности чисто математическими. Указанные модели подразделяются на две большие группы: топологические и сетевые модели.

Совокупность математических соотношений, образующих данную символическую ММ ХТС, в частном случае представляет систему уравнений математического описания ХТС. Используют два метода составления систем МО ХТС. Один метод основан на глубоком изучении физико-химической сущности технологических процессов функционирования ХТС и ее элементов, другой на применении формально-эмпирических математических зависимостей, полученных в результате статистического обследования действующей ХТС. Символические ММ ХТС второго типа обычно называют статистическими моделями. Последние имеют вид регрессионных или корреляционных соотношений между параметрами входных и выходных технологических потоков ХТС.

1.4. Характеристика технологических операторов. Понятие технологической топологии ХТС

При исследовании процессов функционирования ХТС каждый элемент системы рассматривают как *технологический оператор*, преобразующий физические параметры входных материальных и энергетических потоков $x_1, x_2, \dots, x_n$ в физические параметры выходных потоков $y_1, y_2, \dots, y_n$.

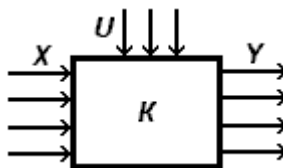


Рис.1.1. Элемент ХТС как технологический оператор

Так, например, химический реактор, в котором протекает экзотермическая реакция $A+B \rightarrow C+Q$, где Q – тепловой эффект реакции, представляет собой технологический оператор, осуществляющий как качественное (в состав выходного технологического потока входит новый химический компонент), так и количественное (температура выходного технологического потока больше температуры входного потока) преобразование физических параметров входного технологического потока, включающего два химических компонента. Теплообменник является технологическим оператором, осуществляющим количественное изменение температур входящих технологических потоков.

Таким образом, каждый элемент ХТС представляет собой многомерный технологический оператор. Символическую математическую модель такого оператора выражают в виде функциональной зависимости:

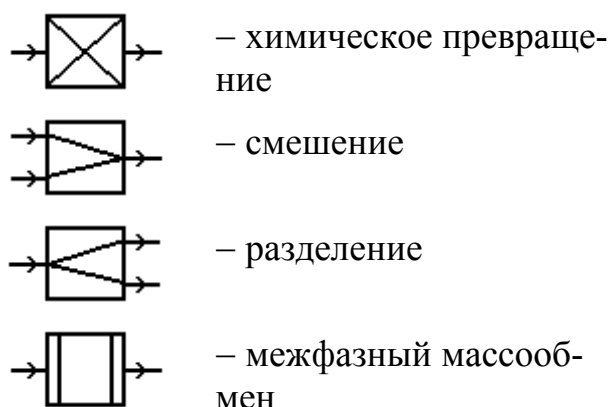
$$Y = f(X, U, K), \quad (1.1)$$

где X – вектор физических параметров входных потоков, Y – вектор физических параметров выходных потоков, K – конструкционные и технологические параметры элемента ХТС, U – вектор управляющих параметров.

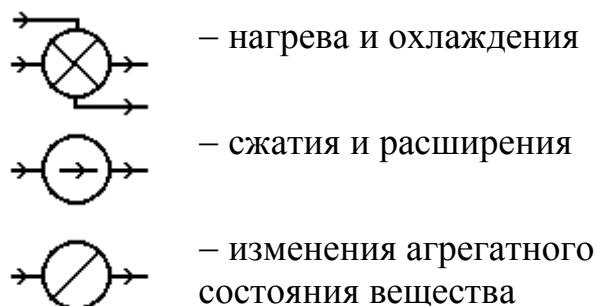
Из всего множества технологических процессов различают только СЕМЬ типовых технологических операторов, с использованием которых возможно синтезировать ХТС любой сложности.

Типовые операторы подразделяются на основные и вспомогательные.

Основные технологические операторы



Вспомогательные технологические операторы



Различия между основными и вспомогательными операторами заключаются в том, что основные технологические операторы обеспечивают функционирование ХТС в требуемом целевом направлении, а вспомогательные – повышают эффективность функционирования системы путем изменения энергетического и фазового состояний технологических потоков.

Следует добавить, что математическое описание типовых технологических процессов достаточно хорошо представлено в специальной литературе и подробно изучалось в курсе "Моделирование ХТП".

В зависимости от целей исследования процессов функционирования ХТС каждый элемент системы можно рассматривать либо как совокупность нескольких типовых операторов, либо как один типовой технологический оператор. Например, подогреватель, в котором происходит химическая реакция разложения компонентов входного потока, представляет собой совокупность двух типовых технологических операторов – нагрева и химического превращения. Ректификационная колонна непрерывного действия (рис. 1.2) может быть представлена совокупностью двух операторов межфазного массообмена 1 и 3, соответствующих верхней и нижней частям колонны, и оператором смешения 2. Последний отражает процесс смешения потоков флегмы и исходной смеси на питающей тарелке.

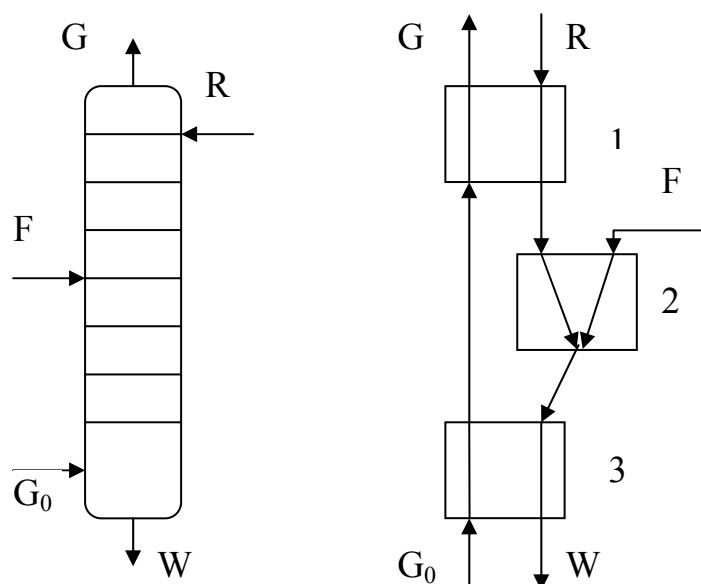


Рис. 1.2. Операторная схема ректификационной колонны :
 G , R , F , G_0 , W – потоки, соответственно, пара легколетучего компонента, флегмы, исходной смеси, паровой поток из испарителя, кубового остатка

На рис. 1.3 изображена операторная схема выпарного аппарата с центральной циркуляционной трубой, включающая операторы нагрева, фазового превращения и разделения. Оператор нагрева отображает процесс теплопередачи от греющего пара к концентрируемому раствору, оператор фазового превращения – переход части растворителя в парообразное состояние. Процессу отделения раствора от вторичного пара в сепараторе соответствует оператор разделения.

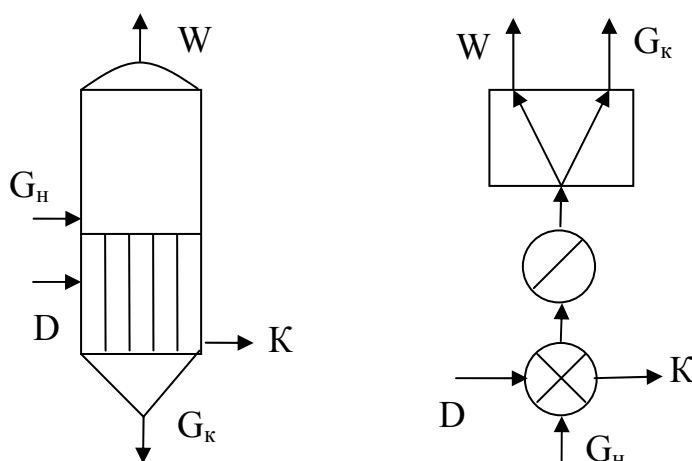


Рис. 1.3. Операторная схема выпарного аппарата с центральной циркуляционной трубой: D , W – потоки греющего и вторичного пара; G_h , G_k потоки исходного и концентрированного растворов; K – конденсат греющего пара

На рис.1.4 представлена операторная схема выпарного аппарата с вынесенной греющей камерой, которая в отличие от предыдущей включает дополнительный оператор разделения, отображающий деление потока упарен-

ного раствора на циркуляционный и продукционный, а также оператор смешения, соответствующий смешению исходного раствора с циркулирующим потоком.

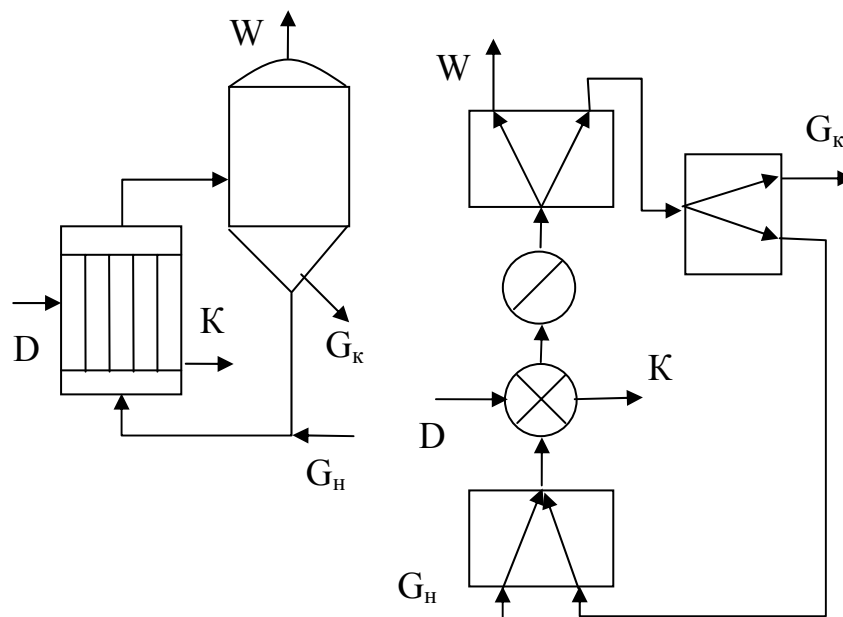


Рис.1.4. Операторная схема выпарного аппарата с вынесенной греющей камерой

Топка с камерой смешения (рис.1.5) может быть представлена схемой, включающей операторы смешения (смешение топлива и воздуха в факеле форсунки), химического превращения (горение топлива) и второго оператора смешения, отображающего разбавление продуктов сгорания атмосферным воздухом для получения газовой смеси с требуемой температурой.

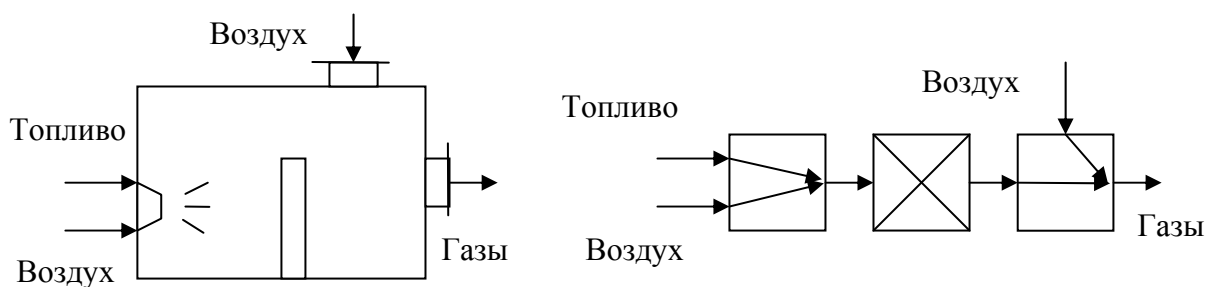


Рис. 1.5. Операторная схема топки с камерой смешения

Взаимодействие отдельных технологических операторов (элементов, подсистем) ХТС осуществляется благодаря наличию между ними определенных технологических связей или технологических соединений. Каждой технологической связи соответствует некоторый материальный или энергетический поток, называемый технологическим потоком.

Характер и особенности технологических связей ХТС, т.е. способ соединения элементов между собой, наглядно отображают с помощью обоб-

щенных иконографических моделей: технологических схем, структурных схем, операторных и функциональных схем.

Чтобы показать принцип составления различного вида схем, рассмотрим цех синтеза аммиака. На рис. 1.6 представлена упрощенная технологическая схема цеха синтеза аммиака.

Азотоводородная смесь (*авс*) поступает в компрессор 1, где сжимается до давления 30 МПа. Затем в инжекторе 2 она смешивается с непрореагировавшей азотоводородной смесью, возвращаемой после реакции, и охлаждается сначала в теплообменнике 3, а потом в испарителе жидкого аммиака 4. При охлаждении азотоводородной смеси конденсируется некоторое количество аммиака, который обычно в ней присутствует. В сепараторе 5 жидкий аммиак отделяют, а азотоводородную смесь подают в колонну синтеза 6, где и осуществляется реакция. Полученный продукт – аммиак конденсируют при охлаждении в водяном конденсаторе 7 и затем отделяют от непрореагировавшей азотоводородной смеси в сепараторе 8. Оставшуюся смесь, имеющую давление 28 МПа, сжимают до давления 30 МПа в циркуляционном компрессоре 9 и вновь возвращают в систему на повторное химическое превращение.

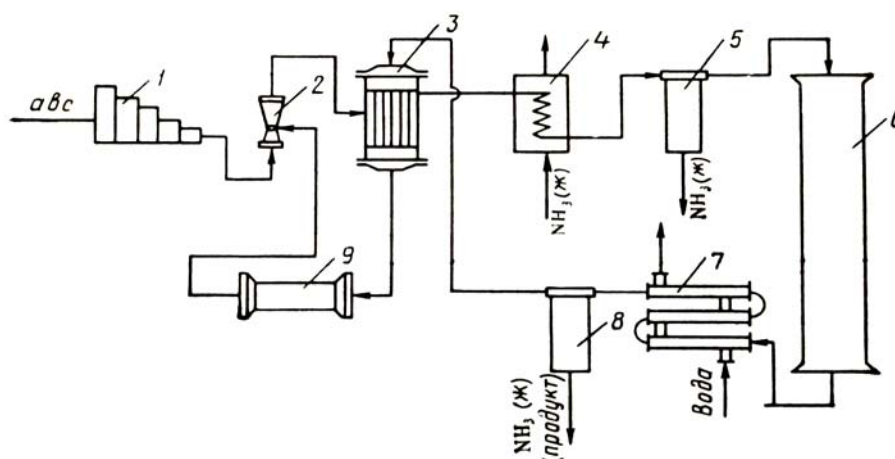


Рис.1.6. Технологическая схема цеха синтеза аммиака (упрощенный вариант): 1- компрессор; 2 – инжектор; 3 – теплообменник; 4 – испаритель жидкого аммиака; 5,8 – сепараторы; 6 – колонна синтеза; 7 – водяной холодильник; 9 – циркуляционный компрессор

Таким образом, технологическая схема ХТС содержит следующую информацию: о химическом составе исходного сырья, промежуточных и конечных продуктах; о типах и способе соединения элементов (аппаратов и машин); о последовательности отдельных технологических процессов. Технологическую схему можно использовать для изображения ХТС как на стадии эксплуатации, так и на стадии проектирования, чтобы получить первое представление о проектируемой системе.

Функциональная схема даёт общее представление о процессе функционирования ХТС. На схеме выделяются основные узлы (подсистемы), выполняющие определенную технологическую операцию, показываются технологические связи между ними. По схеме можно определить, какие операции совершаются в производстве и в какой последовательности. Сведения о типах отдельных элементов функциональная схема не даёт. Функциональная схема производства аммиака показана на рис. 1.7.

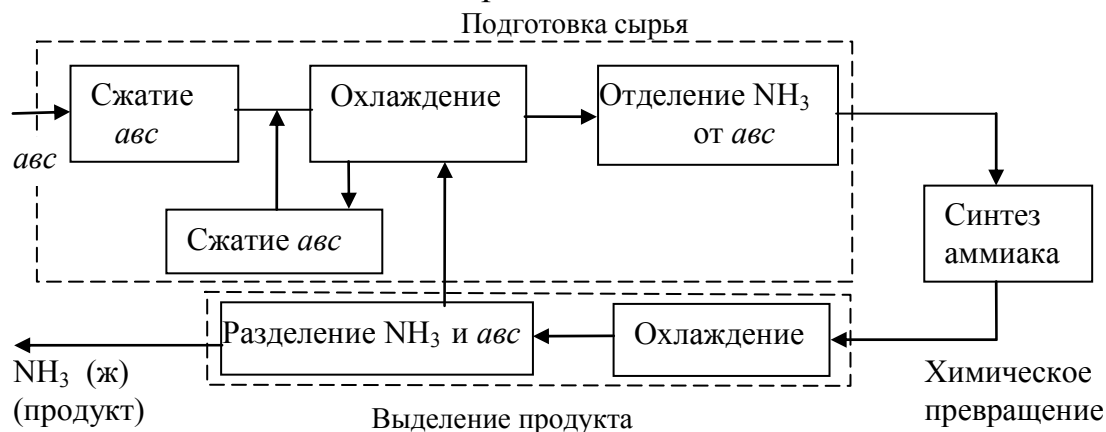


Рис. 1.7. Функциональная схема получения аммиака

Структурная схема ХТС даёт изображение всех элементов ХТС в виде блоков, имеющих несколько входов и выходов, показывает технологические связи между блоками. Как и функциональная, структурная схема не содержит информации об отдельных типах элементов, но зато технологические связи в ней указывают направление движения материальных и энергетических потоков системы (рис.1.8).

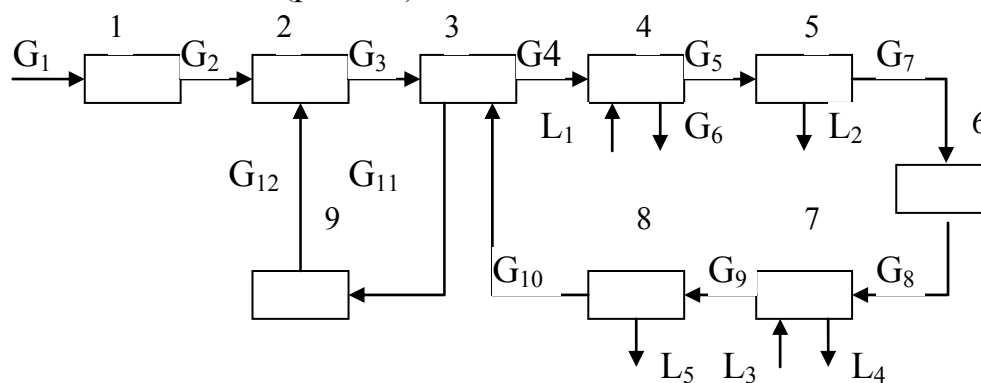


Рис. 1.8. Структурная схема синтеза аммиака:

1- компрессор; 2 – инжектор; 3 – теплообменник; 4 – испаритель жидкого аммиака; 5,8 – сепараторы; 6 – колонна синтеза; 7 – водяной холодильник; 9 – циркуляционный компрессор; G_1 - G_{12} - потоки газа; L_1 - L_5 - потоки жидкости

Операторная схема в отличие от двух предыдущих даёт наглядное представление о физико-химической сущности технологических процессов системы. Для этого каждый элемент ХТС изображают в виде типового технологического оператора, который качественно или количественно преобразует

зует физические параметры входных материальных и энергетических потоков.

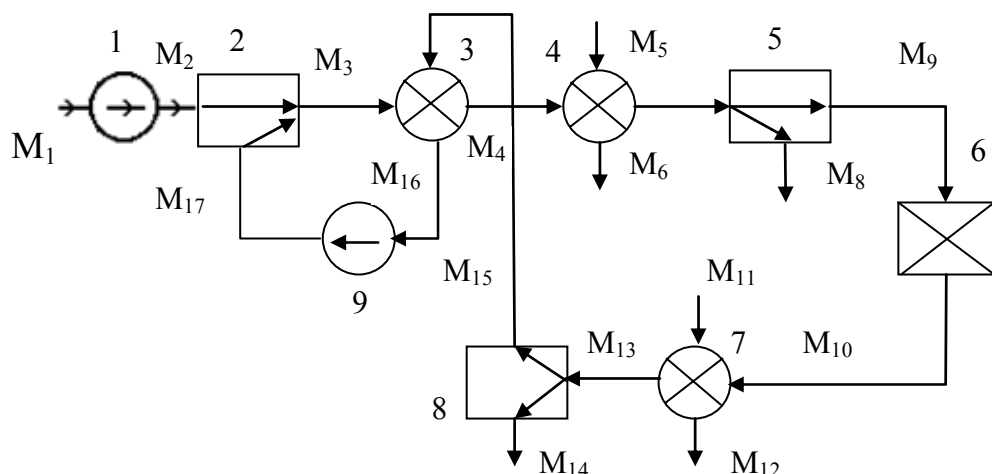


Рис. 1.9. Операторная схема синтеза аммиака:

1- компрессор; 2 – инжектор; 3 – теплообменник; 4 – испаритель жидкого аммиака; 5,8 – сепараторы; 6 – колонна синтеза; 7 – водяной холодильник; 9 – циркуляционный компрессор; M_1 - M_{17} – физические потоки

1.5. Виды технологических связей между операторами

При всей сложности ХТС существуют типовые соединения операторов между собой, объединяющих их в единую схему. К ним относятся: последовательное соединение, параллельное соединение, последовательно-обводное (байпасное) соединение и рециркуляционное соединение. Существует также разновидность сложных соединений, объединяющих несколько типов элементарных соединений одновременно.



Рис. 1.10. Последовательное соединение элементов ХТС

Последовательное соединение является основным соединением технологических операторов между собой. При этом соединении весь технологический поток, выходящий из предыдущего элемента ХТС, полностью поступает на последующий элемент ХТС, причем каждый элемент поток проходит только один раз.

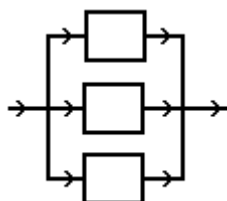


Рис. 1.11. Параллельное соединение элементов ХТС

При параллельном соединении, технологический поток разделяется на

несколько потоков, которые поступают на различные элементы ХТС, причем каждый аппарат поток проходит только один раз. Выходящие из элементов потоки могут объединяться в один поток, а могут выходить отдельно.

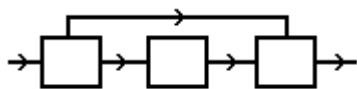


Рис. 1.12. Последовательно-обводное (байпасное) соединение

При последовательно-обводном (байпасном) соединении через ряд последовательно соединенных элементов ХТС проходит только часть потока, а другая часть обходит часть аппаратов, а затем соединяется с частью потока, прошедшего через элементы ХТС.

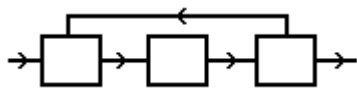


Рис. 1.13. Рециркуляционное соединение

Рециркуляционное соединение характеризуется наличием обратного технологического потока в системе последовательно соединенных элементов, который связывает выход одного из последующих элементов с входом одного из предыдущих элементов. ХТС с использованием этой связи характеризуются коэффициентом рециркуляции, т.е. отношением рециркулирующего потока к суммарному (коэффициент всегда меньше единицы).

Перекрестная технологическая связь обеспечивает более эффективное использование энергии ХТС. Так, тепло газообразных продуктов реакции или отходящих газов можно использовать для предварительного нагрева сырья, поступающего в реактор. В ХТС, где технологические процессы протекают при высоких давлениях, для снижения расхода электрической энергии, преобразуемой в механическую, вводят перекрестные связи; это позволяет использовать энергию сжатых газов или жидкостей, находящихся под давлением.

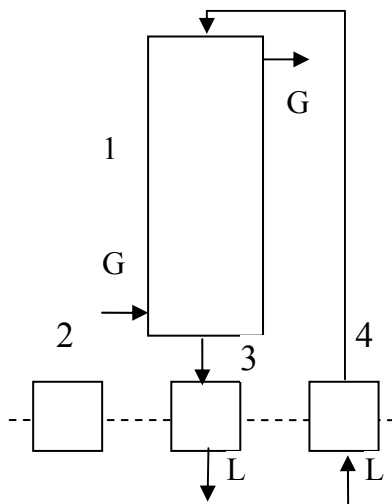


Рис.1.14. Структурная схема ХТС с агрегатом двигатель-насос-турбина:
1 – абсорбер, 2 – электродвигатель, 3 – турбина, 4 – насос

Существуют ХТС, структура технологических связей которых представляет собой простую комбинацию рассмотренных типовых связей. Так, возможны последовательно-параллельное и параллельно-последовательное соединения элементов (рис. 1.15 а,б), последовательное соединение нескольких простых замкнутых ХТС (рис. 1.16, а), сочетание перекрестной и обратной технологической связей (рис. 1.16, б).

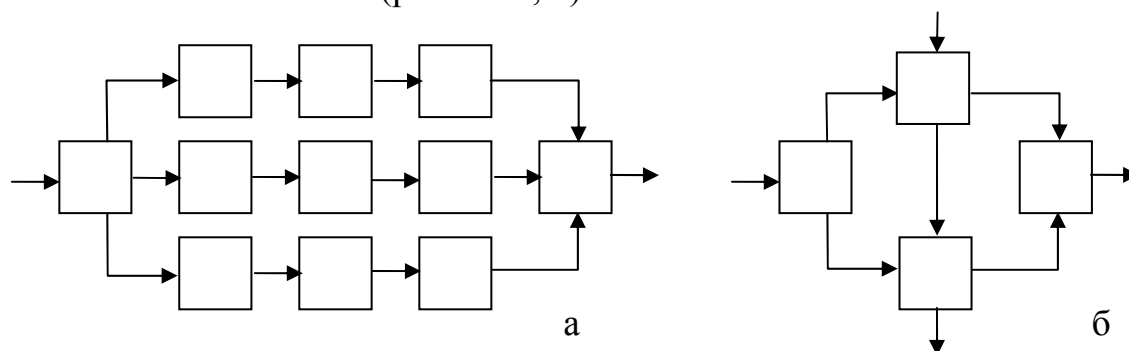


Рис. 1.15. Структурные схемы сложных ХТС:

а – последовательно-параллельное соединение элементов;

б – параллельно-последовательное соединение элементов

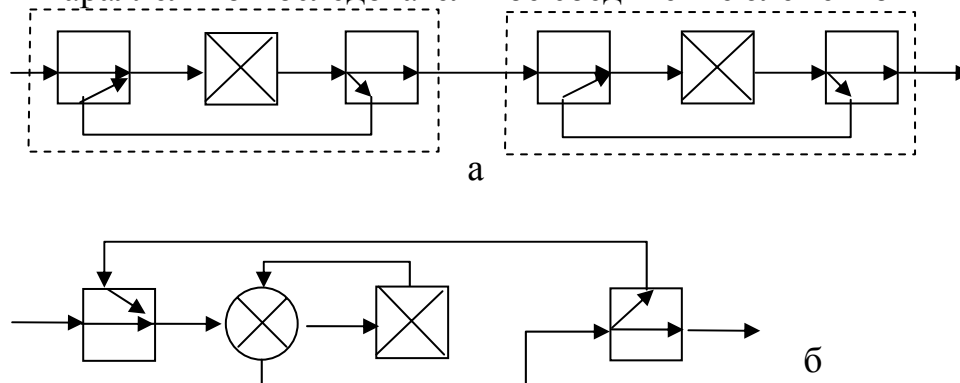


Рис. 1.16. Структурные схемы ХТС с последовательным соединением простых замкнутых подсистем (а) и с комбинацией перекрестной и обратной связей (б)

Следует учесть, что при синтезе и оптимизации ХТС обычно требуется рассматривать достаточно большое количество вариантов схем, отличающихся технологической топологией. Сократить это количество, а следовательно, сэкономить время и деньги помогает наряду с интуицией разработчика, его умение предварительно оценить эффект, которого возможно ожидать при различных видах соединений между элементами ХТС.

Так, при изучении курса "Моделирование ХТП" показывалось, что каскад реакторов идеального смешения (РИС), представляющий собой ряд последовательно соединенных реакторов, вследствие изменения гидродинамической обстановки будет приближаться к реактору идеального вытеснения

(РИВ). Таким образом, замена одного РИС на каскад РИС дает положительный эффект. Замена одного РИВ на каскад РИВ не дает никакого эффекта, однако в случае, если длина РИВ требуется достаточно большой, то бывает более целесообразно (с точки зрения более компактной планировки оборудования) заменить один большой реактор на каскад меньших реакторов.

В качестве примера рассмотрим некоторые *основные эвристики* по применению различных видов связей между реакторами:

- замена одного РИС на каскад РИС, т.е. последовательно соединенных аппаратов (без изменения общего времени контакта), позволяет достичь большей степени превращения за счет изменения гидродинамической обстановки и уменьшить конструктивный размер каждого реактора. Замена одного РИВ на каскад РИВ позволяет только сократить конструктивный размер каждого реактора;
- замена одного РИВ или РИС на ряд параллельно работающих реакторов не снижает общую эффективность, но уменьшает конструктивные размеры параллельно работающих реакторов;
- параллельное подключение дополнительного аппарата позволяет увеличить нагрузку по сырью при сохранении неизменной степени превращения или, возможно, достичь более высокой степени превращения (без изменения скорости подачи сырья) за счет увеличения времени пребывания;
- последовательное соединение применяют, когда необходимо провести химическое превращение в несколько стадий для эндо- или экзотермических реакций (особенно обратимых), протекающих в адиабатических реакторах, т.к. оно позволяет на каждой стадии поддерживать оптимальную температуру (например, окисление SO_2 в SO_3 или синтез аммиака в каталитических реакторах,);
- последовательное соединение применяют, когда необходимо провести технологический процесс с выделением какого-либо компонента после каждой стадии (например, в многоступенчатом воздушном компрессоре после каждой ступени сжатия происходит охлаждение газа и выделение капельной влаги);
- параллельное соединение применяют, когда необходимо оптимальным образом распределить нагрузку между параллельно работающими линиями, отличающимися по производительности, например, вследствие падения активности катализатора, загрязнения теплообменной поверхности и пр.;
- параллельное соединение применяют, когда необходимо увеличить надежность производства и обеспечить возможность его работы с минимальной производительностью без снижения эффективности работы

- оборудования (в случае необходимости, параллельные линии могут быть отключены по экономическим соображениям или для ремонта);
- при байпасном соединении вследствие уменьшения потока, идущего через реактор, увеличивается время пребывания в реакторе и увеличивается степень превращения сырья в продукты (в реакторе);
 - байпасное соединение применяется при конструировании реакторов для проведения обратимых экзотермических реакций путем смешения "горячего" потока после реактора с "холодным" байпасным потоком, что позволяет достичь высокой степени превращения и оптимальных температур и, следовательно, высоких скоростей химических реакций (каталитические реакторы, например, окисления SO_2 в SO_3 или синтеза аммиака);
 - рециркуляция применяется в случаях, когда необходимо увеличить эффективность использования сырья и оборудования за счет увеличения времени пребывания в рециркулируемых аппаратах без изменения размеров оборудования и гидродинамической обстановки;
 - рециркуляция позволяет достичь максимального использования сырья (особенно для обратимых реакций) и увеличить скорость процесса за счет увеличения концентрации исходных реагентов, которая достигается при выделении целевого продукта на линии рецикла и возвратом исходных реагентов в "голову" процесса (например, цикл синтеза аммиака);
 - рециркуляция позволяет уменьшить полноту протекания побочных химических реакций посредством разбавления сырья продуктами реакции, поступающими в "голову" процесса по линии рецикла.

Как было указано, данные эвристики относятся к реакторам, т.е. возможно составить подобные списки эвристик для других элементов ХТС. Кроме того, список эвристик для реакторов может быть расширен за счет эвристик, которые являются следствием указанных выше.

1.6. Постановка задач анализа и синтеза ХТС

Задачи анализа ХТС – это задачи изучения свойств и эффективности функционирования системы в зависимости от структуры технологических связей между элементами и подсистемами, а также в зависимости от конструктивных и режимно-технологических параметров.

Для этого разрабатывают и рассчитывают полную математическую модель ХТС на основе математических моделей отдельных элементов и технологической топологии с целью определения параметров выходных технологических потоков при заданных технологических условиях и параметрах

входных потоков. Для каждого из возможных исследуемых вариантов ХТС вычисляют совокупность показателей эффективности функционирования системы. Сопоставляя значения этих показателей, получают первое представление о недостатках и достоинствах тех или иных вариантов системы.

Задачи синтеза ХТС состоят в выборе структуры технологических связей, значений параметров системы и параметров технологических режимов элементов, исходя из заданных свойств и показателей эффективности функционирования ХТС.

С синтезом ХТС тесным образом связана задача оптимизации ХТС, которая как раз сводится к нахождению экстремального значения выбранного критерия эффективности функционирования системы. В качестве критериев эффективности работы ХТС используют, как правило, экономические критерии (средняя прибыль, приведенный доход, приведенные затраты, себестоимость и т.п.). Иногда используются также и технологические критерии эффективности, например выход получаемого продукта.

Из определения задач анализа, синтеза и оптимизации ХТС видно, что все эти этапы органически связаны друг с другом. Общее у них то, что все они выполняются на основе математической модели ХТС. В то же время для каждого этапа создания ХТС можно сформулировать основную его цель: при создании математической модели – это получение зависимости между параметрами системы; на стадии анализа ХТС – изучение с помощью этой зависимости свойств системы; при синтезе ХТС создаются, рассчитываются и оптимизируются альтернативные варианты ХТС из которых выбирается окончательный вариант системы.

При создании химического производства используют несколько принципов синтеза ХТС.

Декомпозиционный принцип – это математическая формализация метода функциональной декомпозиции, который интуитивно применялся при проектировании и раньше. Из-за сложности разрабатываемых систем проектировщик вынужден осуществлять последовательную декомпозицию исходной задачи на ряд более простых задач. Сначала все химическое производство делят на ряд функциональных подсистем, а затем каждая такая подсистема разделяется до уровня отдельных аппаратов (элементов).

Вместо общей задачи синтеза ХТС решается ряд подзадач, и для них отыскиваются определенные технологические решения, соответствующие современному уровню аппаратного оформления химико-технологического процесса. Из различных вариантов технологической топологии подсистемы и аппаратного оформления некоторого процесса выбирают такие, которые обеспечивают оптимальное значение критерия эффективности синтезируемой ХТС.

Эвристический принцип – это тоже математическая формализация широко используемого проектировщиками интуитивно-эвристического метода, который позволяет специалистам при технологическом проектировании химических производств интуитивно выбирать наиболее удачные варианты решения задачи, без полного перебора всех возможных альтернативных вариантов.

При эвристическом методе, базирующемся на интуиции, принятие решения происходит без обоснования его с помощью доказательств. Но это не снижает его ценности, так как он использует интуитивные факторы и правила, обобщающие знания и большой практический опыт высококвалифицированных специалистов – проектировщиков.

Интегрально-гипотетический принцип основан на последовательных разработке, анализе и оптимизации гипотетической обобщенной структуры синтезируемой ХТС, представляющей собой функциональное объединение всех возможных альтернативных вариантов технологической топологии и аппаратного оформления.

При *эволюционном принципе* сначала создается простейший исходный вариант технологической топологии ХТС, являющийся произвольным первоначальным решением поставленной задачи. После этого производится некоторое изменение (модификация) аппаратного оформления и коррекция структуры технологических связей, определяется коэффициент эффективности функционирования вновь полученного варианта. Затем опять идут этапы синтеза, анализа и оптимизации модифицированного варианта и т.д., пока не будет получено оптимальное значение критерия эффективности функционирования ХТС.

2. Расчет материально-энергетических балансов химико-технологических систем

Основу проектирования новых и анализа функционирования действующих ХТС составляет расчет материальных и энергетических балансов системы в условиях стационарного технологического режима. Этот расчет включает два последовательных этапа: 1) постановку задачи и составление системы уравнений балансов; 2) решение системы уравнений балансов.

В результате решения системы уравнений балансов на стадии проектирования ХТС определяют материальные и тепловые нагрузки и производительность элементов ХТС. Эти количественные характеристики представляют собой исходную информацию для расчета технологических моделей отдельных элементов, а также для технологического и конструкционного расчетов элементов системы. В условиях промышленной эксплуатации ХТС на основе расчета систем уравнений балансов выявляют неучтенные потери вещества и тепла.

2.1. Общий вид системы уравнений балансов

Взаимодействие между элементами ХТС, между системой и окружающей средой происходит через определенное число материальных и энергетических физических потоков. В ХТС выделяют потоки двух видов: технологические и условные. *Технологические потоки* обеспечивают взаимосвязь элементов между собой, взаимодействие между системой и окружающей средой и, следовательно, целенаправленное функционирование ХТС. *Условные потоки* отображают рассеивание (потери) вещества и энергии в окружающую среду и различные материальные и энергетические возмущающие воздействия внешней среды на функционирование ХТС.

Свойства i -го физического потока характеризуются p_i набором следующих параметров состояния:

$$p_i = \{m_i, x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ik}; t_i; P_i; H_i\},$$

где m_i - общий массовый расход вещества; x_{ik} - доля k -го химического компонента; t_i - температура; P_i - давление; H_i - расход тепла.

При исследовании процессов функционирования ХТС рассматривают внешние и внутренние источники (стоки) вещества или энергии системы. *Внешние источники* вещества или энергии ХТС соответствуют материальным и энергетическим физическим потокам, которые поступают в систему. *Внешние стоки* вещества или энергии ХТС отвечают материальным и энергетическим физическим потокам, образующимся в результате функционирования системы.

Внутренние источники (стоки) вносят качественные изменения в процесс функционирования ХТС и отображают эффекты физических и химических

превращений, происходящих внутри элементов системы. *Внутренний материальный источник (сток)* соответствует количеству компонента, вступившего в химическую реакцию, или количеству компонента, образовавшегося в результате химического превращения. *Внутренний тепловой источник (сток)* отвечает количеству тепла, выделяющемуся или поглощающемуся в результате протекания внутри элементов ХТС химических и физических превращений.

Каждому внутреннему источнику (стоку) вещества соответствует *фиктивный материальный поток*, а каждому внутреннему источнику (стоку) тепла – *фиктивный тепловой поток*.

Для каждого элемента (подсистемы) ХТС на основе законов сохранения массы и энергии можно составить систему уравнений материальных и тепловых балансов, включающих следующие независимые уравнения:

а) материального баланса по общему массовому расходу вещества физических потоков:

$$\sum_j^n m_j = 0, \quad (2.1)$$

б) материального баланса по массовому расходу компонентов (химических элементов) физических и фиктивных материальных потоков:

$$\sum_j^n m_j x_{jk} + \sum_i^e G_i = 0, \quad (2.2)$$

в) теплового баланса по расходу тепла физических и фиктивных тепловых потоков:

$$\sum_j^n m_j h_j + \sum_i^e Q_i = 0, \quad (2.3)$$

$$\sum_j^n m_j c_{cpj} t_j + \sum_i^e Q_i = 0, \quad (2.4)$$

где для j -го физического потока m_j - общий массовый расход вещества; x_{jk} - доля k -го компонента в единице общего расхода вещества; h_j - энтальпия; c_{cpj} - средняя удельная теплоемкость; t_j - температура; G_i - массовый расход i -го материального фиктивного потока; Q_i - расход тепла i -го теплового фиктивного потока.

В общем случае каждое из уравнений представляет собой билинейную форму неизвестных параметров физических потоков ХТС, а система уравнений балансов является системой нелинейных уравнений. Однако с помощью следующих допущений любую систему уравнений балансов можно представить в линейной форме:

а) если m_j заданы, то система уравнений балансов линейна относительно переменных x_{jk} и h_j (или t_j);

б) если x_{jk} и (или) h_j заданы, то система уравнений линейна относительно переменных m_j .

Когда члены уравнений системы уравнений балансов являются билинейными формами неизвестных параметров физических потоков, а перечисленные выше допущения применить невозможно, систему уравнений приводят к линейному виду, используя понятие обобщенных потоков ХТС. Обобщенные потоки представляют собой материальный расход или расход тепла, соответствующий p -му параметру i -го физического потока или параметру физического потока ХТС. Выделяют три типа обобщенных потоков: обобщенный материальный поток; обобщенный материальный поток, соответствующий массовому расходу химического компонента; обобщенный тепловой поток, отвечающий расходу тепла физического потока или фиктивному тепловому потоку.

Для i –го элемента (подсистемы) ХТС справедливо линейное уравнение баланса каждого j -го обобщенного потока:

$$\sum_{j=1}^n W_{ji} = 0. \quad (2.5)$$

При расчете материальных и тепловых балансов ХТС систему уравнений балансов обобщенных потоков дополняют уравнениями функциональных связей. Уравнения функциональных связей определяют покомпонентный состав физических потоков; величины источников (стоков) химических компонентов, соответствующих реакции; величины источников (стоков) тепла, соответствующих физико-химическим превращениям; учитывают взаимосвязь между потоками при известных коэффициентах функциональных связей или КПД элементов; зависимость величин потоков от заданных параметров технологических режимов, производительности ХТС по выпуску товарного продукта и т.д.

В общем случае уравнения функциональных связей представляют собой неявные функции многих переменных вида:

$$F_i(\pi_i, \eta, \alpha, v, K, D) = 0, \quad (2.6)$$

где π_i – параметры состояния физических потоков; η – КПД элементов ХТС; α – мольные соотношения компонентов, участвующих в реакции; v – стехиометрические коэффициенты и физико-химические константы; K – конструкционные и технологические параметры элементов ХТС; D – параметры технологических режимов ХТС.

В общем случае системой уравнений математического описания ХТС называют как систему уравнений балансов, так и систему уравнений математической модели ХТС.

2.2. Совместность и обусловленность систем уравнений балансов ХТС

Система уравнений материальных или тепловых балансов для элемента, подсистемы или ХТС в целом представляет собой систему неявных функций ($m \neq n$):

$$\begin{cases} \varphi_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \varphi_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \varphi_m(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases} \quad . \quad (2.7)$$

Все уравнения, входящие в систему, должны быть независимы. Функции $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_m$ называют зависимыми, если хотя бы одна из них представляет собой некоторую функциональную зависимость от других функций.

При составлении системы независимых уравнений материального баланса необходимо учитывать, что баланс по общим массовым расходам равен сумме балансов по массовым расходам всех компонентов. При отсутствии в ХТС химических превращений составление элементных балансов излишне, поскольку элементные балансы входят в покомпонентные балансы.

Система уравнений называется *совместной*, если существует хотя бы одно решение этой системы, в противном случае система *несовместна*.

Говорят, что задача или вычисления плохо обусловлены, если они чрезвычайно чувствительны к ошибкам или к неопределенности исходных данных. Все *плохо обусловленные вычисления* являются результатом применения *численно неустойчивых алгоритмов*. Если задача плохо обусловлена, то никакие усилия, потраченные на организацию изоэшелонных вычислений, не могут дать правильных ответов, исключая случайности. В случае *плохо обусловленной задачи* решения системы уравнений незначительные возмущения (изменения) коэффициентов при неизвестных и (или) свободных членов могут привести к существенным изменениям результатов решения.

2.3. Методы решения систем уравнений балансов ХТС

Современная вычислительная математика располагает большим арсеналом методов, а математическое обеспечение компьютеров – многими пакетами прикладных программ, позволяющих решать различные возникающие на практике линейные и нелинейные системы уравнений. Чтобы ориентироваться в этом разнообразии методов и программ и сделать правильный выбор, нужно разбираться в основах построений методов и алгоритмов, учитывающих специфику постановок задач, знать их сильные и слабые стороны и границы применимости.

2.3.1. Прямые методы решения систем

линейных алгебраических уравнений

Прямые методы (точные методы) приводят к решению за конечное число арифметических операций.

Метод обратной матрицы

С использованием понятия матрицы и матричных операций система линейных алгебраических уравнений

[illegible]

может быть записана в матричном виде:

$$\bar{A} \bar{x} = \bar{b}, \quad (2.9)$$

где $\bar{A}$ – матрица коэффициентов системы, $\bar{x}$ – вектор неизвестных, $\bar{b}$ – вектор свободных членов:

$$\overline{\mathbf{A}} = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_{11} & \mathbf{a}_{12} & \dots & \mathbf{a}_{1n} \\ \mathbf{a}_{21} & \mathbf{a}_{22} & \dots & \mathbf{a}_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathbf{a}_{n1} & \mathbf{a}_{n2} & \dots & \mathbf{a}_{nn} \end{bmatrix}, \quad \overline{\mathbf{x}} = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_1 \\ \mathbf{x}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_n \end{bmatrix}, \quad \overline{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{b}_n \end{bmatrix}. \quad (2.10)$$

Решение сводится к нахождению обратной матрицы $\bar{A}^{-1}$ и затем вычислению произведения этой матрицы на вектор $\bar{b}$.

$$\bar{\mathbf{x}} = \bar{\mathbf{A}}^{-1} \bar{\mathbf{b}}. \quad (2.11)$$

Этот метод удобно применять в тех случаях, когда несколько раз решается система с разными правыми частями. В этом случае достаточно один раз вычислить обратную матрицу $\bar{A}^{-1}$ и затем умножать её на разные векторы $\bar{b}$.

Недостатком метода являются трудности вычисления обратной матрицы, особенно если матрица большой размерности, либо если её определитель близок к нулю.

Метод Гаусса

Этот метод известен также как метод исключений, поскольку на первом этапе метода («прямой ход») происходит поочередное исключение одного из неизвестных во всех уравнениях, кроме одного. Результатом «прямого хода» является приведение матрицы коэффициентов исходной системы к верхнетреугольной, все элементы которой, расположенные ниже главной диагонали, равны нулю.

Второй этап («обратный ход») состоит в отыскании неизвестных путем последовательной подстановки определяемых значений неизвестных в уравнения, начиная с последнего, вышерасположенные.

Пример. Методом Гаусса решить систему

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 4; \\ 2x_1 + 3x_2 + x_3 = 9; \\ x_1 - x_2 - x_3 = -2. \end{cases}$$

Прямой ход. На первом шаге умножаем первое уравнение сначала на -2 и складываем его со вторым, получаем преобразованное второе уравнение. Затем первое уравнение умножаем на -1 и складываем с третьим, получаем преобразованное третье уравнение:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 4; \\ x_2 - x_3 = 1; \\ -2x_2 - 2x_3 = -6. \end{cases}$$

На втором шаге полученное преобразованное второе уравнение умножаем на 2 и складываем с третьим, получаем заново преобразованное третье уравнение:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 4; \\ x_2 - x_3 = 1; \\ -4x_3 = -4. \end{cases}$$

В результате преобразований получили треугольную систему уравнений, равносильную исходной решаемой системе уравнений.

Обратный ход. Из последнего уравнения определяем, что $x_3=1$. Из второго и первого уравнений находим:

$$x_2=1+x_3, \quad x_2=1+1=2; \quad x_1=4-x_2-x_3, \quad x_1=4-2-1=1.$$

Метод Гаусса-Жордана

В основе метода лежат алгоритм Жордана обращения матриц и стратегия метода исключения (метод Гаусса). Однако для получения решения системы

$\bar{x} = \bar{A}^{-1} \bar{b}$, согласно этому методу, обратная матрица не ищется в явном виде, а сразу находится произведение обратной матрицы на вектор свободных членов $\bar{A}^{-1} \bar{b}$. Поэтому алгоритм Жордана применяется к расширенной матрице $(\bar{A} : \bar{b})$. В результате элементарных преобразований слева получается единичная матрица, справа – вектор неизвестных $(\bar{E} : \bar{x})$.

Расширенная матрица

$$(\overline{\overline{A}}:\overline{\overline{b}}) = \left[\begin{array}{cccc} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{array} \right] : \left[\begin{array}{c} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{array} \right] \quad (2.12)$$

с помощью допустимых элементарных преобразований (умножение строки на константу и сложение ее с другими строками) приводится к виду:

$$(\overline{\overline{E}}:\overline{\widetilde{b}}) = \left[\begin{array}{cccc} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{array} \right] : \left[\begin{array}{c} \widetilde{b}_1 \\ \widetilde{b}_2 \\ \vdots \\ \widetilde{b}_n \end{array} \right], \quad (2.13)$$

что соответствует системе уравнений

$$x_1 = \widetilde{b}_1, \quad x_2 = \widetilde{b}_2, \dots, \quad x_n = \widetilde{b}_n.$$

В этом случае отпадает необходимость вычисления значений неизвестных при «обратном ходе», которые оказываются равными значениям свободных членов в преобразованной матрице.

Пример. Методом Гаусса-Жордана решить систему уравнений

$$\begin{cases} 2x_1 - 7x_2 = 3.5; \\ 3x_1 - x_2 = 10. \end{cases}$$

Составляем расширенную матрицу из коэффициентов системы и столбца свободных членов размера 2×3 :

$$\begin{array}{c} \begin{bmatrix} 2 & -7 \\ 3 & 1 \end{bmatrix} : \begin{bmatrix} 3.5 \\ 10 \end{bmatrix} \rightarrow \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & -3.5 \\ 3 & -1 \end{bmatrix} : \begin{bmatrix} 1.75 \\ 10 \end{bmatrix}}^{\text{I}} \rightarrow \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & -3.5 \\ 0 & 9.5 \end{bmatrix} : \begin{bmatrix} 1.75 \\ 4.75 \end{bmatrix}}^{\text{II}} \rightarrow \\ \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & -3.5 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} : \begin{bmatrix} 1.75 \\ 0.5 \end{bmatrix}}^{\text{III}} \rightarrow \overbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} : \begin{bmatrix} 3.5 \\ 0.5 \end{bmatrix}}^{\text{IV}}. \end{array}$$

В результате получаем слева единичную матрицу, а справа – преобразованный столбец свободных членов, значения которых соответствуют искомым корням системы. Таким образом, $x_1=3,5$; $x_2=0,5$.

2.3.2. Итерационные методы решения систем линейных алгебраических уравнений

При решении систем линейных алгебраических уравнений итерационным методом можно выделить три этапа.

1. Приведение исходной системы вида $\overline{\overline{A}} \overline{x} = \overline{b}$ к преобразованной (итерационной) форме $\overline{x} = \overline{C} \overline{x} + \overline{d}$.

2. Анализ системы на ходимость метода.
3. Решение преобразованной системы одним из методов последовательных приближений, в основе которых лежит та или иная стратегия получения вектора решений по его предыдущему приближению.

Метод простых итераций

Метод простых итераций отличается простотой вычислительного процесса и во многих случаях дает хорошую сходимость.

Представить систему из трех уравнений вида (2.8) в итерационной форме можно путем записи каждого его уравнения в виде решения относительно одного из неизвестных, например:

$$\begin{cases} x_1 = & + c_{12}x_2 + c_{13}x_3 + d_1 \\ x_2 = c_{21}x_1 & + c_{23}x_3 + d_2 \\ x_3 = c_{31}x_1 + c_{32}x_2 & + d_3 \end{cases} \quad (2.14)$$

Или, в матричном виде,

$$\bar{x} = \bar{\bar{C}} \bar{x} + \bar{d},$$

где

$$\bar{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}; \quad \bar{\bar{C}} = \begin{bmatrix} 0 & c_{12} & c_{13} \\ c_{21} & 0 & c_{23} \\ c_{31} & c_{32} & 0 \end{bmatrix}; \quad \bar{d} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \end{bmatrix}. \quad (2.15)$$

Элементы матрицы $\bar{\bar{C}}$ и вектора $\bar{d}$ вычисляются по формулам:

$$c_{ij} = -a_{ij}/a_{ii}, \quad d_i = b_i/a_{ii}, \quad i, j = 1, 2, 3.$$

При использовании итерационного метода решения необходимо оценить сходимость метода для данной системы, которая зависит от матрицы коэффициентов $\bar{\bar{C}}$. Процесс сходится в том случае, если норма матрицы $\bar{\bar{C}}$ меньше единицы, т.е.

$$\|\bar{\bar{C}}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 c_{ij}^2} < 1. \quad (2.16)$$

Это условие является достаточным для сходимости метода. Для его выполнения необходимо, чтобы на этапе приведения к итерационной форме каждое уравнение системы решалось относительно той неизвестной переменной, которая имеет наибольший по модулю коэффициент. Поэтому порядок расположения уравнений в системе имеет важное значение.

Стратегия метода простых итераций основана на последовательном приближении к искомому решению системы, при этом каждое следующее $(k+1)$ приближение получается в результате подстановки в правую часть преобразованной системы приближения, полученного на предыдущей k -й итерации, т.е.

$$\bar{x}^{(k+1)} = \bar{C} \bar{x}^{(k)} + \bar{d}. \quad (2.17)$$

В качестве начального приближения обычно принимают вектор-столбец свободных членов преобразованной системы: $\bar{x}^{(0)} = \bar{d}$. Условие окончания итерационного процесса для получения решения принимает вид:

$$\left| \bar{x}_i^{(k+1)} - \bar{x}_i^{(k)} \right| \leq \varepsilon \quad (2.18)$$

или

$$\max \left| \bar{x}_i^{(k+1)} - \bar{x}_i^{(k)} \right| \leq \varepsilon. \quad (2.19)$$

Пример. Имеем систему уравнений

$$\begin{cases} -7x_1 - 2x_2 + x_3 = 1 \\ 8x_1 + 3x_2 + 3x_3 = 2 \\ x_1 + 6x_2 - x_3 = 3 \end{cases}$$

Для получения преобразованной системы уравнений необходимо сделать допустимые преобразования над исходной системой с тем, чтобы диагональные коэффициенты матрицы были максимальными по модулю. Для этого второе уравнение сделаем первым и в качестве второго используем третье. Сложив первое и второе уравнения исходной системы, получим третье: $x_1 + x_2 + 4x_3 = 3$. Тогда в итерационной форме имеем систему:

$$\begin{cases} x_1 = -(3/8)x_2 - (3/8)x_3 + 2/8 \\ x_2 = (1/6)x_1 + (1/6)x_3 + 3/6 \\ x_3 = -(1/4)x_1 - (1/4)x_2 + 3/4 \end{cases}$$

Проверяем условие сходимости:

$$\|\bar{C}\| = \sqrt{(-3/8)^2 + (-3/8)^2 + (-1/6)^2 + (1/6)^2 + (1/4)^2 + (-1/4)^2} = \sqrt{266/576} < 1;$$

так как $\|\bar{C}\| < 1$, то решение может быть получено методом простых итераций.

Метод Зейделя

Метод Зейделя представляет собой модификацию метода простых итераций. В этом методе при вычислении $(k+1)$ -го приближения неизвестной x_i используются уже рассчитанные на текущей итерации $(k+1)$ -е приближения неизвестных $x_1, x_2, \dots, x_i$ и k -е приближения неизвестных $x_i, x_{i+1}, \dots, x_n$. Расчетная формула Зейделя имеет вид:

$$x_i^{(k+1)} = d_i + \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^n c_{ij} x_j^{(k)}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.20)$$

Метод Зейделя в большинстве случаев дает более быструю сходимость, чем метод простых итераций.

2.3.3. Системы нелинейных уравнений

Пусть задана система нелинейных уравнений вида:

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n)=0, \quad i=1, 2, \dots, n, \quad (2.21)$$

где f_i - некоторые действительные функции аргументов $x_1, x_2, \dots, x_n$, причем одна или несколько, или все являются нелинейными относительно одного (или нескольких, или всех аргументов $x_1, x_2, \dots, x_n$).

В матричной форме эта система уравнений имеет вид:

$$\bar{f}(\bar{x}) = 0, \text{ где } \bar{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}; \quad \bar{f}(\bar{x}) = \begin{bmatrix} f_1(\bar{x}) \\ \vdots \\ f_n(\bar{x}) \end{bmatrix}. \quad (2.22)$$

Требуется найти такую совокупность значений $x_i, i=1, 2, \dots, n$, которая удовлетворяет всем уравнениям системы.

В общем случае решение системы нелинейных уравнений не может быть получено в аналитическом виде. Решение, как правило, ищется численными методами, для которых анализ сходимости оказывается значительно сложнее по сравнению с линейными системами, а порой становится практически невозможным. Кроме того, следует отметить, что сходимость методов существенно зависит от задания начального приближения, т.е. от того, насколько начальное приближение близко к искомому решению. Поэтому при выборе начального приближения необходимо использовать максимум имеющейся информации об искомом решении.

Метод простых итераций

При использовании этого метода система уравнений приводится к итерационной форме вида:

$$x_i = \varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad i=1, 2, \dots, n, \quad (2.23)$$

для которой используется расчетная формула:

$$x_i^{(k+1)} = \varphi_i(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}), \quad i=1, 2, \dots, n, \quad (2.24)$$

где выражения для функции $\varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ получаются из системы исходных уравнений аналитическим решением каждого уравнения относительно соответствующего неизвестного $x_i, i=1, 2, \dots, n$; $x_i^{(k+1)}, x_i^{(k)}$ – значения $(k+1)$ -го и k -го приближения i -го неизвестного.

С использованием матричной формы записи расчетная формула метода имеет вид:

$$\bar{x}_i^{(k+1)} = \bar{\varphi}(\bar{x}^{(k)}), \text{ где } \bar{x}^{(k+1)} = \begin{bmatrix} x_1^{(k+1)} \\ x_2^{(k+1)} \\ \vdots \\ x_n^{(k+1)} \end{bmatrix}, \quad \bar{\varphi}(\bar{x}^{(k)}) = \begin{bmatrix} \varphi_1(\bar{x}^{(k)}) \\ \varphi_2(\bar{x}^{(k)}) \\ \vdots \\ \varphi_n(\bar{x}^{(k)}) \end{bmatrix}.$$

Процесс итераций заканчивается при выполнении на очередной итерации условия $\max |x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}| \leq \varepsilon$ для $i=1, 2, \dots, n$, где ε – заданная точность.

Метод Ньютона-Рафсона

Сущность метода Ньютона-Рафсона удобно рассмотреть на примере системы двух нелинейных уравнений.

$$f_1(x_1, x_2)=0, \quad f_2(x_1, x_2)=0. \quad (2.25)$$

Допустим, что имеется k -е приближение к решению $x_1^{(k)}, x_2^{(k)}$. Величина поправки $\Delta x_1^{(k)}, \Delta x_2^{(k)}$ для получения нового $(k+1)$ -го приближения может быть определена из условия, что новое приближение будет соответствовать решению:

$$f_1(x_1 + \Delta x_1^{(k)}, x_2 + \Delta x_2^{(k)})=0, \quad f_2(x_1 + \Delta x_1^{(k)}, x_2 + \Delta x_2^{(k)})=0. \quad (2.26)$$

Полагая, что $\Delta x_1^{(k)}, \Delta x_2^{(k)}$ – величины малые, функции уравнений системы (2.26) можно представить в виде разложения в ряд Тейлора по степени Δx с точностью до членов первого порядка малости:

$$\begin{aligned} f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) + \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \Delta x_2 &= 0, \\ f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) + \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_1} \Delta x_1 + \frac{\partial f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)})}{\partial x_2} \Delta x_2 &= 0. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Перенеся первые слагаемые в уравнениях в правую часть, систему можно записать в матричной форме:

$$\bar{J}(\bar{x}^{(k)}) \Delta \bar{x}^{(k)} = -\bar{f}(\bar{x}^{(k)}), \quad (2.28)$$

где

$$\bar{J}(\bar{x}^{(k)}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\bar{x}^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(\bar{x}^{(k)})}{\partial x_2} \\ \frac{\partial f_2(\bar{x}^{(k)})}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(\bar{x}^{(k)})}{\partial x_2} \end{bmatrix} \quad (2.29)$$

- матрица частных производных, называемая матрицей Якоби (определитель этой матрицы называется якобианом),

$$\Delta \bar{x}^{(k)} = \begin{bmatrix} \Delta x_1^{(k)} \\ \Delta x_2^{(k)} \end{bmatrix}; \quad \bar{f}(\bar{x}^{(k)}) = \begin{bmatrix} f_1(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) \\ f_2(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}) \end{bmatrix}. \quad (2.30)$$

С применением метода обратной матрицы система линейных уравнений (2.28) имеет следующее решение:

$$\Delta \bar{x}^{(k)} = -\bar{J}^{-1}(\bar{x}^{(k)}) \bar{f}(\bar{x}^{(k)}), \quad (2.31)$$

где $\bar{J}^{-1}(\bar{x}^{(k)})$ - матрица, обратная матрице Якоби.

С учетом того, что $\bar{x}^{(k+1)} = \bar{x}^{(k)} + \Delta \bar{x}^{(k)}$, соотношение для определения очередного приближения может быть записано в виде:

$$\bar{x}^{(k+1)} = \bar{x}^{(k)} - \bar{J}^{-1}(\bar{x}^{(k)}) \bar{f}(\bar{x}^{(k)}). \quad (2.32)$$

Такой итерационный метод решения систем нелинейных уравнений принято называть методом Ньютона-Рафсона.

В качестве критерия окончания решения используется условие:

$$\max_{1 \leq i \leq n} |x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}| \leq \varepsilon. \quad (2.33)$$

Для улучшения сходимости метода можно использовать корректирующий параметр λ . Тогда расчетная формула модифицированного метода Ньютона-Рафсона приводится к виду:

$$\bar{x}^{(k+1)} = \bar{x}^{(k)} - \lambda \bar{J}^{-1}(\bar{x}^{(k)}) \bar{f}(\bar{x}^{(k)}), \text{ где } 0 < \lambda < 1. \quad (2.34)$$

Процесс итераций заканчивается при выполнении того же условия (2.33).

Иногда применяется другая модификация, которая отличается от выше рассмотренного метода Ньютона-Рафсона тем, что матрица Якоби и обратная ей вычисляются только для начального приближения. Рассчитанная таким образом обратная матрица частных производных используется затем на всех последующих итерациях. Такая модификация сокращает объем вычислений на каждой итерации, однако сходимость итерационного процесса при этом может оказаться медленнее, чем в двух предыдущих методах.

Последовательность решения системы нелинейных уравнений по методу Ньютона-Рафсона состоит в выполнении следующих этапов:

- 1) выбор вектора начального приближения $\bar{x}^{(0)}$;
- 2) вычисление матрицы Якоби $\bar{J}$ и якобиана $|\bar{J}|$;
- 3) нахождение обратной матрицы $\bar{J}^{-1}$;
- 4) расчет очередного приближения по формуле (2.32);
- 5) проверка условия окончания итераций (2.33);

Если заданная степень точности еще не достигнута, то процесс вычислений повторяется начиная с пункта 2.

2.4. Общая методика составления и решения систем уравнений балансов ХТС

Для расчета материальных и тепловых нагрузок на элементы ХТС необходимо выполнить следующие операции:

- 1) изучить физико-химическую сущность процессов ХТС, а также принципы функционирования системы и ее элементов;
- 2) составить подробную спецификацию величин, отображающих переменные и параметры ХТС, заданные технологические условия и константы, характеризующие физико-химические свойства и состояние веществ, участвующих в технологических процессах;
- 3) выразить функциональные связи между переменными и параметрами ХТС в виде уравнений материальных и тепловых балансов и уравнений функциональных связей;
- 4) выделить из множества неизвестных, входящих в систему уравнений балансов, в соответствии с технологическими условиями и физико-химической сущностью технологических процессов подмножество независимых (свободных) и зависимых (базисных) переменных;
- 5) определить, согласно технологическим условиям и физико-химической сущности технологических процессов, численные значения свободных переменных;
- 6) представить с помощью специальных допущений и преобразований систему уравнений балансов как совокупность линейных уравнений. Составить программу решения системы уравнений на ЭВМ;
- 7) оценить порядок ошибок и результаты решения системы уравнений балансов на ЭВМ.

Информацию о параметрах потоков и о нагрузках на элементы системы, полученную в результате решения систем уравнений балансов, представляют следующим образом: а) сводной таблицей материального и теплового балансов; б) структурной схемой с таблицами покомпонентного состава физических потоков; в) структурной схемой с покомпонентным составом физических потоков; г) диаграммой балансов.

Пример. Составление и решение системы уравнений материального баланса производства серной кислоты.

На рис. 2.1 приведена упрощенная операторная схема получения серной кислоты из элементарной серы.

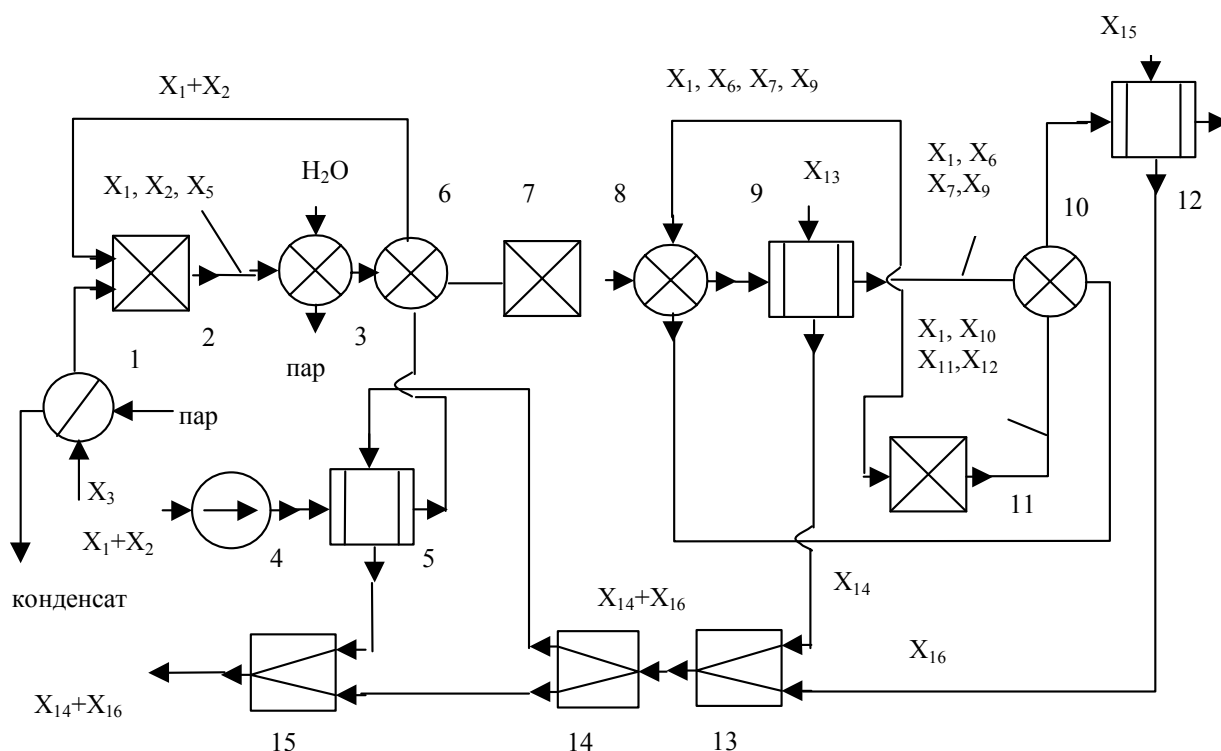


Рис. 2.1. Операторная схема производства серной кислоты из элементарной серы:

1- сероплавитель; 2- печь сжигания серы; 3- котел - утилизатор; 4- вентилятор; 5- сушильная башня; 6- теплообменник для подогрева воздуха; 7,11- контактные узлы I и II ступеней; 8,10- теплообменники для охлаждения обжигового газа перед абсорбцией; 9,12- абсорберы I и II ступеней; 13,15- смешение потоков кислоты; 14- отбор кислоты на сушильную башню

Комовая сера поступает в плавитель серы 1, в котором под действием теплоты насыщенного водяного пара давлением 0,7 МПа, конденсирующегося в змеевиках и рубашке, переходит в жидкое состояние и подогревается до температур 140 - 150 °С.

Расплавленная сера фильтруется для удаления механических примесей и подается с помощью погружных насосов через форсунки в печь сжигания серы циклонного типа 2, распыляется форсунками и сгорает с образованием диоксида серы и выделением значительного количества теплоты, что приводит к повышению температуры газа до 1000-1100 °С. Необходимый для горения воздух вентилятором 4 подается в сушильную башню 5, в которой из него, при орошении концентрированной серной кислотой, удаляются пары воды, подогревается в теплообменнике 6 за счет теплоты обжигового газа и поступает в печь.

Обжиговой газ, образующийся в печи за счет сгорания серы, содержащий 9 - 9,5 объёмных процентов диоксида серы и 11 – 11,5 объёмных процентов кислорода поступает в газотрубный котел-утилизатор 3, в котором

охлаждается до температуры 560-570 °С. В котле-утилизаторе образуется перегретый водяной пар давлением 4 МПа и температурой 450 °С. После котла-утилизатора газовая смесь проходит воздушный теплообменник 6 и с температурой 430 °С поступает на I ступень контактирования 7, состоящую из трёх слоёв катализатора, которые газ проходит последовательно, охлаждаясь между слоями в выносных теплообменниках.

После третьего слоя катализатора газ, содержащий около 7,5 % триоксида серы, охлаждается в теплообменнике 8 и поступает на первую ступень абсорбции в насадочный абсорбер 9 для поглощения SO_3 раствором серной кислоты. Далее газовая смесь, содержащая не более 1 % диоксида серы, последовательно подогревается в теплообменниках 10 и 8 и поступает на вторую ступень контактирования – четвертый и пятый слой катализатора контактного аппарата 11. После контактного аппарата, газ охлаждается в теплообменнике 10 и поступает во вторую абсорбционную башню 12, в которой из газа поглощается весь триоксид серы. Содержание SO_2 в газе, выбрасываемом в атмосферу, не превышает санитарные нормы.

Серная кислота из башен 9 и 12 объединяется в один поток и поступает на склад готовой продукции. Часть кислоты отбирается на орошение сушильной башни 5 и после поглощения водяных паров вновь присоединяется к основному потоку кислоты.

Для облегчения составления системы уравнений балансов на основе операторной схемы составляем схему материальных потоков (рис. 2.2).

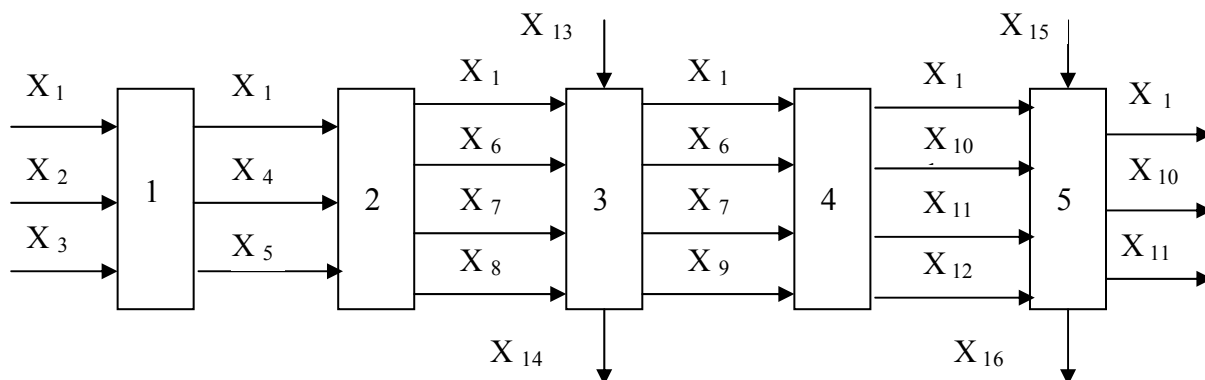


Рис. 2.2. Схема материальных потоков (пояснения к схеме в таблице 2.1)

Исходные данные:

- содержание SO_2 в печных газах9,5 об%;
- степень контактирования на I ступени.....95%;
- степень абсорбции на I ступени.....99,9%;
- степень контактирования на II ступени.....99,7%;
- степень абсорбции на II ступени.....99,9%;
- концентрация получаемой кислоты.....94,5%;

- состав воздуха: а) азот.....76,7 масс%;
б) кислород.....23,3 масс%.

Для расчета баланса составляем систему линейных уравнений, из которой находим все величины, показанные на рис. 2.2. Эта система легко решается с помощью ЭВМ.

Уравнения для 1-го блока (печь сжигания серы).

Уравнение материального баланса:

$$X_2 + X_3 = X_4 + X_5. \quad (2.35)$$

Сумма масс входящих компонентов должна равняться сумме масс выходящих. Так как азот X_1 не реагирует ни в одном реакторе, то его масса будет постоянной во всех реакторах.

Уравнение состава воздуха:

$$\frac{X_2}{X_1} = \frac{23,3}{76,7}. \quad (2.36)$$

Отношение масс компонентов равно отношению их процентного содержания в составе воздуха.

Стехиометрическое соотношение:

$$\frac{X_5}{X_3} = \frac{64}{32}. \quad (2.37)$$

Отношение массы диоксида серы после печи X_5 к массе серы до печи X_3 равно отношению молекулярных масс этих веществ.

Уравнение состава обжигового газа:

$$\frac{X_5 / 64}{X_5 / 64 + X_1 / 28 + X_4 / 32} = 0,095. \quad (2.38)$$

Отношение массы диоксида серы X_5 к своей молекулярной массе деленное на сумму отношений выходящих из печи газов к своим молекулярным массам будет равняться количеству SO_2 в составе выходящих газов, вычисленному в долях.

Уравнение второго блока (первая ступень контактирования).

Уравнение степени контактирования:

$$\frac{X_5 - X_7}{X_5} = 0,95. \quad (2.39)$$

Отношение разности масс входящего X_5 и выходящего X_7 диоксида серы к массе этого газа, входящего на первую ступень контактирования, будет равняться степени контактирования SO_2 , выраженной в долях.

Уравнение материального баланса:

$$X_6 + X_7 + X_8 = X_4 + X_5. \quad (2.40)$$

Суммы масс входящих в реактор компонентов должны равняться суммам масс выходящих.

Уравнение химической реакции контактирования:

$$X_8 = (X_5 - X_7) \frac{80}{64}. \quad (2.41)$$

Количество SO_3 , образовавшегося после I ступени контактирования, будет равняться разности поступающего X_5 и выходящего X_7 из первой ступени SO_2 , умноженной на отношение молярных масс SO_3 и SO_2 .

Уравнение третьего блока (первая ступень абсорбции).

Уравнение степени превращения SO_3 :

$$\frac{X_8 - X_9}{X_8} = 0,999. \quad (2.42)$$

Разность входящего X_8 и выходящего X_9 триоксида серы, отнесенная к входящему его количеству будет равна степени абсорбции SO_3 , выраженной в долях.

Уравнение материального баланса:

$$X_8 + X_{13} = X_{14} + X_9. \quad (2.43)$$

Количество поступающих веществ (SO_3 и воды X_{13}) будет равняться количеству полученной серной кислоты X_{14} и непрореагировавшего SO_3 .

Уравнение химической реакции:

$$\frac{X_8 - X_9}{80} = \frac{0,945X_{14}}{98}. \quad (2.44)$$

Разность входящего и выходящего SO_3 , отнесенная к своей молекулярной массе, будет равняться количеству полученной серной кислоты, отнесенной к молекулярной массе H_2SO_4 .

Уравнение четвертого блока (II ступень контактирования).

Уравнение степени превращения:

$$(X_5 - X_{11})/X_5 = 0,997. \quad (2.45)$$

Отношение разности входящего на первую ступень контактирования SO_2 (X_5) и выходящего со второй ступени (X_{11}) к количеству поступающего на I ступень SO_2 равно общей степени контактирования, выраженной в долях.

Уравнение материального баланса:

$$X_6 + X_7 + X_9 = X_{10} + X_{11} + X_{12}. \quad (2.46)$$

Сумма масс веществ, входящих во вторую ступень контактирования равна сумме масс выходящих веществ.

Уравнение химической реакции:

$$(X_6 - X_{10})/16 = (X_{12} - X_9)/80. \quad (2.47)$$

Отношение разности входящего и выходящего из реактора кислорода к его молекулярной массе будет равняться отношению разности выходящего и входящего в аппарат SO_3 к его молекулярной массе.

Уравнение пятого блока (вторая ступень абсорбции)

Суммарная масса H_2SO_4 :

$$X_{14} + X_{16} = 1515. \quad (2.48)$$

Сумма масс кислоты, выходящей из I и II абсорберов будет равняться заданной производительности.

Уравнение материального баланса:

$$X_{12} + X_{15} = X_{16}. \quad (2.49)$$

Сумма масс SO_3 и воды, входящих в абсорбер, будет равняться количеству серной кислоты.

Уравнение химической реакции

$$\frac{X_{12}}{80} = \frac{0,945X_{16}}{98}. \quad (2.50)$$

Отношение поступающей SO_3 (X_{12}) к своей молекулярной массе будет равняться количеству полученной во втором абсорбере серной кислоты X_{16} , умноженной на концентрацию H_2SO_4 , выраженную в долях и отнесенную к молекулярной массе H_2SO_4 .

После того, как уравнения составлены, их надо преобразовать таким образом, чтобы они были записаны в одну строчку и в правой части были бы числа без переменных или нули. Преобразованная система уравнений материального баланса имеет вид:

$$\begin{aligned} x_2 + x_3 - x_4 - x_5 &= 0, \\ 23,3x_1 - 76,7x_2 &= 0, \\ 64x_3 - 32x_5 &= 0, \\ 2,286x_1 + 2x_4 - 9,526x_5 &= 0, \\ 0,05x_5 - x_7 &= 0, \\ x_4 + x_5 - x_6 - x_7 - x_8 &= 0, \\ 1,25x_5 - 1,25x_7 - x_8 &= 0, \\ 1x_8 - 1000x_9 &= 0, \\ x_8 - x_9 + x_{13} - x_{14} &= 0, \\ x_8 - x_9 - 0,7714x_{14} &= 0, \\ 3x_5 - 1000x_{11} &= 0, \\ x_6 + x_7 + x_9 - x_{10} - x_{11} - x_{12} &= 0, \\ 5x_6 + x_6 - 5x_{10} - x_{12} &= 0, \\ x_{14} + x_{16} &= 1515, \\ x_{12} + x_{15} - x_{16} &= 0, \\ x_{12} - 0,771x_{16} &= 0. \end{aligned} \quad (2.51)$$

Система уравнений (2.51) решается на ПЭВМ. Например в пакете MathCAD имеется встроенная процедура Isolve решения системы линейных уравнений. Вид документа MathCAD, реализующего решение вышеприведенной системы уравнений, приведен ниже.

Матрица коэффициентов системы уравнений материального баланса

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 23.3 & -76.7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 64 & 0 & -32 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2.286 & 0 & 0 & 2 & -9.526 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.05 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1.25 & 0 & -1.25 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \times 10^3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -0.771 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \times 10^3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & -1 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 1 & -5 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -0.771 \end{pmatrix}$$

Вектор свободных членов системы уравнений

$$V = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1.515 \times 10^3 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Систему уравнений материального баланса
решаем путем обращения к встроенной
функции решения системы линейных
уравнений - Isolve(M,V)

$$X := \text{Isolve}(M, V)$$

Вектор решения

$$X = \begin{pmatrix} 3.412 \times 10^3 \\ 1.036 \times 10^3 \\ 468.863 \\ 567.501 \\ 937.727 \\ 344.791 \\ 46.886 \\ 1.114 \times 10^3 \\ 1.114 \\ 333.773 \\ 2.813 \\ 56.205 \\ 329.664 \\ 1.442 \times 10^3 \\ 16.694 \\ 72.899 \end{pmatrix}$$

Получаем вектор материальных потоков X и заполняем таблицу 2.1.

Таблица 2.1

Результаты решения системы уравнений материального баланса

Переменная	<i>Значение</i>	
	тонн в сутки	килограмм в час
X_1 – масса азота в воздухе и обжиговом газе (о.г.)	3411,565	142148,54
X_2 – масса кислорода в воздухе	1036,369	43182,04
X_3 – массовый расход серы	468,892	19537,17
X_4 – масса кислорода в о.г. после печи сжигания серы	567,476	23644,83
X_5 - масса SO_2 в о.г. после печи сжигания серы	937,78	39074,17
X_6 - масса O_2 в о.г. после I ступени контактирования	344,572	14364,67
X_7 - масса SO_2 в о.г. после I ступени контактирования	46,879	1953,71
X_8 - масса SO_3 в о.г. после I ступени контактирования	1113,619	46400,79
X_9 - масса SO_3 в о.г. после I ступени абсорбции	1,114	46,42
X_{10} - масса O_2 в о.г. после II ступени контактирования	333,733	13905,54
X_{11} масса SO_2 в о.г. после II ступени контактирования	2,813	117,21
X_{12} - масса SO_3 в о.г. после II ступени контактирования	56,208	2342
X_{13} – расход воды на I ступень абсорбции	329,631	13734,63
X_{14} – масса моногидрата H_2SO_4 после I ступени абсорбции	1442,137	60089,04
X_{15} - расход воды на II ступень абсорбции	16,654	693,92
X_{16} масса моногидрата H_2SO_4 после II ступени абсорбции	72,863	3035,96

Проверка:

$$X_1 + X_2 + X_3 + X_{13} + X_{15} = X_{10} + X_1 + X_{11} + X_{14} + X_{16}, \quad (2.52)$$

$$3411,565+1036,369+468,892+329,631+16,654=333,733+3411,565+2,813+1442,137+72,863$$

$$5263,111=5263,111.$$

Материальный баланс рассчитан правильно.

3. Определение степеней свободы химико-технологических систем

3.1. Понятие степени свободы ХТС

Для решения задач проектирования и эксплуатации ХТС необходимо иметь математическую модель системы в виде совокупности независимых функциональных соотношений между переменными и параметрами ХТС.

Переменные и параметры ХТС, входящие в математическую модель системы, называют *информационными переменными*. Функциональные соотношения математической модели ХТС, или информационные связи, представляют собой систему n независимых неявных функций m информационных переменных.

Степенью свободы F ХТС называют разность между числом информационных переменных (ИП), которое необходимо для составления полной математической модели системы и числом информационных связей (или условий), которые существуют между информационными переменными:

$$F=m-n. \quad (3.1)$$

Все свободные ИП должны быть независимы между собой. Число степеней свободы соответствует числу управляемых переменных и определяет число регуляторов или число систем автоматического управления, необходимых для обеспечения заданного качества процесса функционирования системы или подсистемы.

Регламентированные и оптимизирующие проектные переменные ХТС

Все информационные переменные, полностью характеризующие функционирование системы, подразделяют на проектные (заданные) и расчетные (искомые) переменные. В качестве свободных ИП системы из всего множества информационных переменных могут быть выбраны только лишь проектные переменные ХТС.

Проектные переменные это такие ИП, которые характеризуют основную цель функционирования ХТС, воздействие на систему или подсистему внешней окружающей среды, взаимосвязь данной системы с другими ХТС и возможность оптимизации процессов ее функционирования в соответствии некоторым критерием качества.

Расчетные (искомые) переменные – это ИП, определение которых представляет собой цель проектирования и исследования системы.

Среди проектных переменных выделяют регламентированные и оптимизирующие переменные ХТС.

Регламентированные переменные определяют основную цель функционирования ХТС, влияние внешней среды на систему, взаимосвязь данной системы с другими системами.

Большая часть этих переменных находится по данным проектного задания и требованиям технологических условий. Например: массовый расход, состав, температура и давление потоков сырья; тип и активность катализаторов химических превращений; конструкционный тип аппаратов; диаметр и высота слоя катализатора.

Оставшиеся степени свободы следует отнести к оптимизирующим переменным, варьирование численных значений которых при заданных регламентированных переменных обеспечивает оптимизацию процесса функционирования системы в соответствии с некоторой целевой функцией. Как правило, эта функция носит экономический характер.

Реальный процесс функционирования ХТС протекает при наличии определенных ограничений на значения технологических и конструкционных переменных системы. Для обеспечения корректности постановки задачи исследования процессов функционирования ХТС и резкого сокращения объема вычислительных процедур по оптимизации данной системы в качестве оптимизирующих проектных переменных необходимо прежде всего выбирать информационные переменные двух видов:

- 1) принимающие согласно проектному заданию и технологическим условиям, дискретные значения (например, конструкционный тип аппаратов; стандартизованные или нормализованные геометрические размеры оборудования; допустимые типы катализатора или растворителя и т.д.);
- 2) которые по требованиям проектного задания и технологических условий или вследствие взаимодействия элементов системы между собой имеют узко ограниченный диапазон возможных значений.

Если число степеней свободы ХТС после выбора оптимизирующих проектных переменных указанных выше двух типов информационных переменных еще не полностью израсходовано, то оптимизирующими выбирают такие ИП, изменение значений которых в широком диапазоне при заданных регламентированных проектных переменных обеспечивает оптимизацию системы.

Определение числа степеней свободы ХТС

Ранее отмечалось, что степень свободы F системы находится как разность между числом информационных переменных и числом информационных связей.

$$F = \sum_{i=1}^n F_{\text{э}i} - \sum_{j=1}^k F_j, \quad (3.2)$$

где F_{ji} – число степеней свободы каждого i –го отдельного элемента, F_j – число информационных переменных, соответствующих каждой j –й технологической связи между соседними элементами.

Как уже отмечалось, с точки зрения практических задач проектирования и эксплуатации ХТС для числа степеней свободы системы справедливо соотношение:

$$F = F_{\Pi} = F_p + F_o, \quad (3.3)$$

где F_{Π} – общее число проектных переменных; F_p – число регламентированных проектных переменных; F_o – число оптимизирующих проектных переменных.

Информационные потоки ХТС и их структура

Свойства каждого физического потока ХТС характеризуют набором параметров, или информационных переменных. Если каждую ИП полагать некоторым *информационным потоком*, то при математическом моделировании системы одному физическому потоку ХТС будет соответствовать совокупность информационных потоков. Направление каждого из этих потоков при моделировании ХТС на стадии оптимизации и проектирования в общем случае не совпадает с направлением физического потока системы. Каждую ИП, отвечающую некоторому параметру системы или элемента, также представляют в виде внешнего входного или выходного информационного потока ХТС.

При математическом моделировании ХТС совокупность информационных связей, образующих математическую модель каждого элемента (подсистемы), рассматривают как некоторый *информационный оператор*, преобразующий входные информационные потоки элемента в его выходные информационные потоки. При этом *входные информационные потоки* каждого отдельного элемента соответствуют его свободным ИП, а *выходные информационные потоки* – базисным ИП. Считают, что входные информационные потоки ХТС или элементов выходят из определенных независимых источников информации, а выходные связаны с некоторыми приемниками информации.

При решении задач проектирования оптимальных ХТС для каждого отдельного элемента (подсистемы) свободные и базисные ИП могут в общем случае отвечать как информационным переменным входных, так и выходных физических потоков элементов. Поэтому направление информационных потоков, отображающих параметры некоторого физического потока, может совпадать и (или) не совпадать с направлением этого потока системы.

На рис. 3.1 представлена структура информационных потоков для теплообменника ХТС, на входы которого поступают физические потоки горячей жидкости и хладагента.

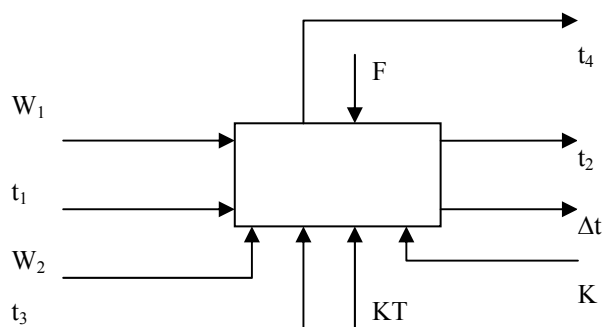


Рис. 3.1. Структура информационных потоков теплообменника некоторой ХТС:

F - поверхность теплообмена, $КТ$ – конструктивный тип теплообменника, K - коэффициент теплопередачи, W_1, W_2 - массовые расходы охлаждаемой жидкости и хладагента, $t_1 - t_4$ - температуры технологических потоков

4. Математические модели технологических операторов

На начальных этапах проектирования ХТС создаются более простые математические модели ТО, обеспечивающие сохранение желаемого уровня гомоморфизма сущности физико-химических процессов, происходящих в элементе. На завершающих этапах проектирования необходимо применять более точные и сложные модели ТО, которые более полно учитывают кинетические характеристики технологических процессов и наиболее реально отражают влияние параметров технологических режимов и параметров элементов на функционирование ХТС в целом.

Для получения упрощенных математических моделей ТО используются методы линеаризации, теории приближений функций, методы планирования эксперимента, а также методы аппроксимации непрерывных элементов с распределенными параметрами дискретными элементами с сосредоточенными параметрами.

4.1. Формы представления символических математических моделей технологических операторов ХТС

В случаях, когда данных о кинетических характеристиках процессов функционирования элементов ХТС недостаточно или они полностью отсутствуют, символическую математическую модель каждого ТО можно представить в форме линейных уравнений с коэффициентами функциональных связей в виде коэффициентов разделения (факторов разделения) или КПД.

Для элемента ХТС, в котором не происходит химического превращения имеет место уравнение материального баланса:

$$\lambda_{ik} = \sum_{s=1}^n g_{isk} , \quad (4.1)$$

где λ_{ik} – массовый расход химического компонента k на входе в i –й элемент; g_{isk} – массовый расход k –го компонента в s -м технологическом потоке или s –й фазе на выходе из i –го элемента.

Коэффициент разделения δ_{sik} для k -го компонента в каждой s -й фазе определяют как

$$\delta_{sik} = \frac{g_{isk}}{\lambda_{ik}}. \quad (4.2)$$

В реальных условиях технологические процессы, протекающие в элементах ХТС, находятся далеко от состояния равновесия. Одним из возможных способов оценки технологической эффективности элементов ХТС является применение понятия КПД технологического оператора, который показывает степень приближения процесса к равновесию.

КПД химического реактора можно оценить степенью превращения некоторого i -го химического компонента. Степень превращения i -го компонента в гомогенном проточном реакторе зависит от типа аппарата. Для реактора полного смешения, когда происходит необратимая реакция первого порядка, степень превращения

$$c_i = 1 - (1 + k_i \theta)^{-1}, \quad (4.3)$$

а для реактора полного вытеснения

$$c_i = 1 - \exp(-k_i \theta), \quad (4.4)$$

где k_i – константа скорости химической реакции; θ – время пребывания.

КПД или эффективность теплообменника равна отношению действительно переданного тепла к максимальному теплу, которое могло бы быть передано в бесконечно длинном теплообменнике:

$$E = \frac{(Wc)_{гор} (T_{гор,вх} - T_{гор,вых})}{(Wc)_{min} (T_{гор,вх} - T_{хол,вх})} \quad \text{при} \quad (Wc)_{min} = (Wc)_{гор}, \quad (4.5)$$

$$E = \frac{(Wc)_{хол} (T_{хол,вых} - T_{хол,вх})}{(Wc)_{min} (T_{гор,вх} - T_{хол,вх})} \quad \text{при} \quad (Wc)_{min} = (Wc)_{хол}. \quad (4.6)$$

Использование понятия эффективности исключает проблему неизвестных выходных температур и позволяет относительно легко анализировать сложные теплообменные подсистемы ХТС.

Для абсорбционных аппаратов ХТС основным показателем технологической эффективности является КПД в виде коэффициента извлечения, определяемого уравнением:

$$\eta_{аб} = \frac{C_{нг} - C_{кг}}{C_{нг} - C_{г}^*}, \quad (4.7)$$

где $C_{нг}$, $C_{кг}$ – концентрации поглощаемого компонента в газе, поступающем в аппарат и выходящем из него, C_r^* – концентрация поглощаемого компонента в газе, равновесная с начальной концентрацией его в жидкости.

4.2. Матрицы преобразования технологических операторов

Если для j -го технологического оператора ХТС выходные переменные $[Y_{m1}^j]$ являются линейной функцией от вектора параметров входных потоков $[X_{n1}^j]$, то символическая модель элемента может быть записана в следующей матричной форме:

$$[Y_{m1}^j] = [R_{mn}^j][X_{n1}^j], \quad (4.8)$$

где $[R_{mn}^j]$ – матрица преобразования или операционная матрица, j -го технологического оператора; $m(n)$ – число параметров выходных (входных) потоков.

Элементы матрицы преобразования отражают связь между входными и выходными переменными. Матрица преобразования состоит из столбцов, отвечающих каждой входной переменной, и из строк, отвечающих каждой выходной переменной. Каждый элемент матрицы преобразования представляет собой соответствующий коэффициент функциональной связи в виде коэффициентов разделения или КПД, значение которого не зависит от параметров входных потоков.

Матрица преобразования технологического оператора разделения, соответствующего разделителю потока, в которой $r_{11}=r_{22}=\dots=r_{nn}=a=\text{const}$, будет:

$$[R_{mn}^j] = a [E_{mn}], \quad (4.9)$$

причем $[E_{mn}]$ – единичная матрица.

Функциональная связь для разделителя потоков имеет следующий вид:

$$[Y_{n1}^j] = a[E_{nn}][X_{n1}^j]. \quad (4.10)$$

Для технологического оператора разделения, соответствующего некоторому сепаратору (отделителю потока), функциональную связь можно выразить следующим образом:

$$[Y_{m1}^j] = \begin{bmatrix} r_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & r_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \\ 0 & 0 & \dots & r_{mm} \end{bmatrix} [X_{n1}^j]. \quad (4.11)$$

Причем элементы матрицы преобразования не равны между собой и представляют различные функции параметров элемента ХТС.

Функциональную связь между векторами параметров входных $[X]$ и выходных $[Y]$ технологических потоков химического реактора представляют в следующем виде:

$$[Y] = ([E] + [C][S])[X], \quad (4.12)$$

где $[E]$ – единичная матрица; $[C]$ – матрица констант скорости химических реакций; $[S]$ – матрица стехиометрических коэффициентов.

Матричная математическая модель абсорбера может выглядеть следующим образом:

$$\begin{bmatrix} y_{\text{вых}} \\ x_{\text{вых}} \\ t_{\text{вых}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{16} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{26} \\ a_{31} & a_{32} & \cdots & a_{36} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} G \\ L \\ y_{\text{вх}} \\ x_{\text{вх}} \\ t_{\text{вх}} \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (4.13)$$

Слева – вектор-столбец выходных переменных; справа – вектор-столбец входных переменных (единица добавлена для учета свободных членов в уравнениях модели); в середине – матрица преобразования (некоторые ее элементы могут равняться нулю).

Ход процесса определяют следующие параметры входных потоков: G – массовый расход газа; L – массовый расход жидкости; $t_{\text{вх}}$ – температура входного потока жидкости, $y_{\text{вх}}$, $x_{\text{вх}}$ – концентрации поглощаемого компонента во входном потоке газа и жидкости, соответственно. Набор этих величин составляет вектор входных параметров.

Вектор выходных параметров, характеризующих работу абсорбера, включает следующие показатели: $y_{\text{вых}}$, $x_{\text{вых}}$ – концентрации поглощаемого компонента в выходящем потоке газа и жидкости, соответственно; $t_{\text{вых}}$ – температура выходного потока жидкости.

Матричная форма представления модели позволяет непосредственно рассчитывать выходные параметры, если известны входные.

Для технологических операторов ХТС с распределенными параметрами, к которым относятся аппараты, где протекают противоточные массообменные процессы, нахождение элементов матриц преобразования практически сводится к свертке зонной ячеечной модели по пространственной координате и ее линеаризации в некотором диапазоне изменения параметров вектора входных потоков. Подобная свертка математической модели применяется также в тех случаях, когда химико-технологические процессы рассчитывают на основе средних движущих сил или равновесных зависимостей.

Для определения матриц преобразования технологических операторов ХТС используются *аналитический* и *статистический* методы. Аналитический метод определения элементов операционных матриц технологических операторов ХТС основан на получении аналитических решений уравнений математической модели ТО. Этот метод используется, когда процессы описываются ММ с сосредоточенными параметрами (реакторы полного смешения, теплообменники смешения и т.д.).

Статистический метод может быть использован для получения простых математических моделей произвольных элементов ХТС практически с любой степенью сложности их исходных математических моделей.

Сущность статистического метода заключается в нахождении коэффициентов матрицы преобразования технологического оператора путем применения методов планирования эксперимента на математической модели, отражающей физико-химическую природу процесса. Использование метода планирования эксперимента на математической модели позволяет значительно сократить расчетные процедуры и получить достаточно корректные результаты в заданном диапазоне изменений входных параметров.

Наиболее распространены полный факторный эксперимент и его дробные реплики. Корреляционные уравнения, выводимые с помощью этого метода, имеют следующий вид:

$$y_j = a_0^{(j)} + \sum_i a_i^{(j)} x_i + \sum_{i,k} a_{ik}^{(j)} x_i x_k + \sum_{i,k,e} a_{ike}^{(j)} x_i x_k x_e + \dots, \quad (4.14)$$

где $a_i^{(j)}$ - коэффициент при линейных членах; $a_{ik}^{(j)}$, $a_{ike}^{(j)}$ - коэффициенты при эффектах взаимодействия.

Для нахождения коэффициентов уравнений методом полного факторного эксперимента требуется провести 2^n расчетов на модели (n – число входных параметров). Необходимо отметить, что значимость эффектов взаимодействия, учитывающих нелинейность математической модели, полностью определяется интервалом варьирования переменных, в котором получены корреляционные уравнения. При достаточно малых интервалах варьирования взаимодействия становятся незначимыми, а уравнения функциональной связи – линейными.

4.3. Матричный и детерминантный методы анализа химико-технологических систем

Матричный метод анализа ХТС основан на том, что математическая модель ХТС может быть получена объединением матриц преобразования отдельных технологических операторов в соответствии с технологической топологией и структурной блок-схемой системы. Такой подход к анализу функционирования или полному расчету ХТС позволяет получить решение безытерационным методом и сочетает в себе точность и возможность полной формализации расчетных процедур.

Расчет и оптимизация ХТС с помощью операционных матриц заключаются в составлении *эквивалентной матрицы преобразования* системы, которая выражает зависимость всех переменных ХТС.

Композиция операционных матриц отдельных элементов ХТС производится на основе анализа структурной блок-схемы системы, и выражение ее эквивалентной операционной матрицы $[S]$ через операционные матрицы технологических операторов $[A_k]$ является отражением структурных особенностей системы.

Рассмотрим, в качестве примера, последовательное соединение двух элементов ХТС, имеющих операционные матрицы $[A_1]$ и $[A_2]$.

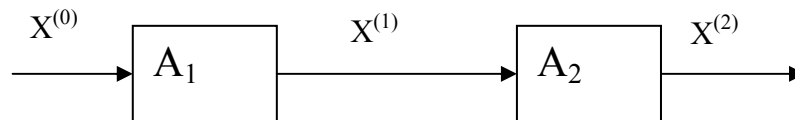


Рис. 4.1. Определение эквивалентной матрицы преобразования последовательного соединения двух элементов ХТС

Для первого элемента связь входа и выхода может быть записана следующим образом:

$$X^{(1)} = [A_1] X^{(0)}. \quad (4.15)$$

Аналогично, для второго элемента:

$$X^{(2)} = [A_2] X^{(1)}. \quad (4.16)$$

Свертка этих двух элементов к одному равносильна исключению из выражений (4.15) и (4.16) промежуточных переменных вектора.

$$X^{(2)} = [A_2] [A_1] X^{(0)} = [S] X^{(0)} \quad (4.17)$$

В этой формуле $[S] = [A_2] [A_1]$ – операционная матрица двух последовательно соединенных элементов ХТС.

В тех случаях, когда задача анализа ХТС состоит в расчете материального баланса какого-либо одного химического компонента, для ее решения можно применить *детерминантный метод анализа*. Этот метод основан на представлении математической модели каждого элемента ХТС в виде линейного уравнения с коэффициентами разделения, имеющими постоянные значения, и использовании теорем линейной алгебры. Детерминантный метод является частным случаем матричного метода анализа ХТС.

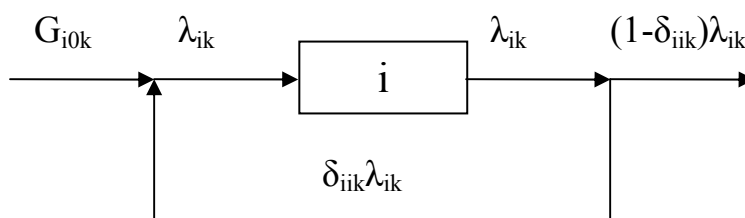


Рис. 4.2. Структурная схема простой контурной ХТС

Для i -го элемента ХТС, который охвачен обратным (рециклическим) технологическим потоком (рис. 4.2), из решения уравнения материального баланса k -го химического компонента:

$$G_{i0k} + \delta_{iik} \lambda_{ik} = \lambda_{ik} \quad (4.18)$$

определяют массовый расход этого компонента во входном потоке общего питания λ_{ik} :

$$\lambda_{ik} = G_{i0k} / (1 - \delta_{iik}), \quad (4.19)$$

где G_{i0k} – массовый расход компонента k в свежем питании i -го элемента; δ_{iik} – рециклический коэффициент разделения для k -го компонента в i -м элементе.

5. Топологический метод анализа и топологические модели химико-технологических систем

Топологический метод анализа ХТС позволяет формальным образом устанавливать функциональную связь между технологической топологией и количественными характеристиками функционирования системы в виде материальных и тепловых нагрузок на элементы ХТС. С помощью топологического метода анализа можно разрабатывать оптимальные алгоритмы расчета многомерных систем уравнений математических моделей ХТС, выбирать оптимальную стратегию решения задач анализа функционирования и оптимизации сложных систем.

Топологический метод анализа ХТС основан на рассмотрении математических *иконографических (топологических)* моделей систем, которыми являются потоковые и структурные графы, информационно-потоковые мультиграфы, информационные и сигнальные графы ХТС.

Классификация топологических моделей ХТС. Для решения задач исследования ХТС используют три класса топологических моделей.

К первому классу топологических моделей относятся *потоковые и структурные графы*. Эти графы отображают особенности технологической топологии системы и дают возможность устанавливать непосредственную связь между изменениями технологической структуры и количественными характеристиками ХТС.

Ко второму классу топологических моделей принадлежат *информационно-потоковые мультиграфы и информационные графы*. Эти графы отображают характеристические особенности символических математических моделей и позволяют разрабатывать оптимальную стратегию решения задач исследования ХТС.

К третьему классу топологических моделей относятся *сигнальные графы*, которые графически изображают функциональные связи между пере-

менными символических математических моделей ХТС. Сигнальные графы можно применять для определения динамических и статических характеристик ХТС, расчета функций чувствительности характеристик систем к изменениям их параметров, а также для оценки устойчивости процессов функционирования ХТС.

5.1. Основные понятия и определения теории графов

Граф – это фигура или конфигурация, образованная совокупностью точек (вершин или узлов); некоторые из них могут быть соединены отрезками прямых, ломанных или кривых линий. Линии могут иметь направление (тогда они называются дугами) или не иметь его (ребра).

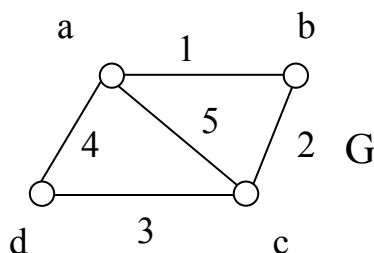


Рис. 5.1. Граф, определяемый множеством вершин $X=\{a, b, c, d\}$

Две точки называются смежными, если они определяют ребро или дугу графа. С каждой неизолированной вершиной i графа G связано одно или несколько ребер (дуг). Эти ребра называются *инцидентными* вершине i . Так, вершине a на рис. 5.1 инцидентны ребра 1, 4, 5, вершине c – ребра 2, 3, 5 и т.д.

Две различные дуги *смежны*, если они имеют общую вершину. Последовательность дуг, при которой конец одной дуги является началом другой, называется *путем*. Путь, в котором никакая вершина дважды не встречается, называется *элементарным*.

Если начальная и конечная точки пути совпадают, образуется *контур*. Он называется *элементарным*, если все его вершины различны (за исключением начальной и конечной вершин, которые совпадают). *Длина пути (контур)* – это число дуг, которые его образуют.

Петлей называется контур единичной длины; петля связывает точку саму с собой (рис. 5.2).

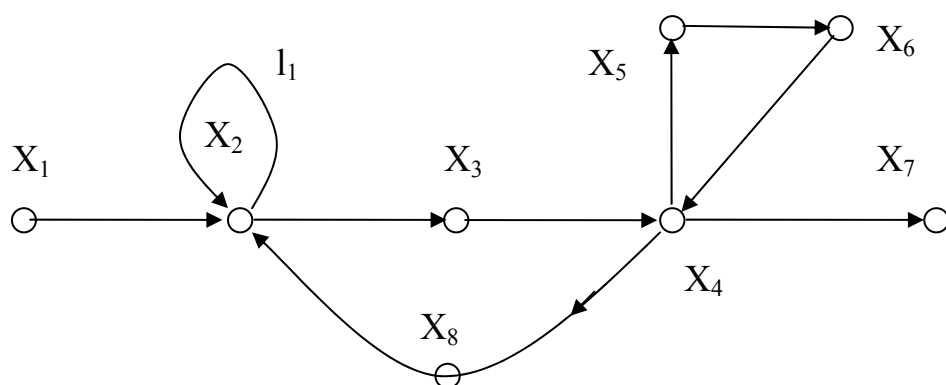


Рис. 5.2. Путь, контур и петля ориентированного графа:

путь – последовательность вершин $x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_4, x_7$; элементарный путь – x_1, x_2, x_3, x_4, x_7 ; контур – $x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_4, x_8, x_2$; элементарный контур – x_5, x_6, x_4, x_5 ; петля – l_1

Граф называется *связным*, если для каждой пары вершин существует соединяющая их цепь (рис. 5.3, а). *Несвязный* граф состоит из нескольких отдельных связных графов или его компонентов (рис. 5.3, б).

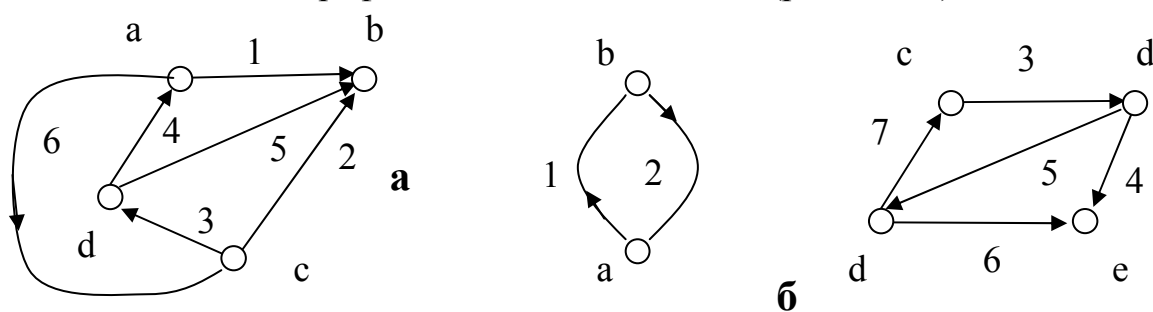


Рис. 5.3. Связный (а) и несвязный (б) графы

Граф является не геометрической, а топологической фигурой. Последней называют такую фигуру, определенные свойства которой инвариантны при взаимнонепрерывном и взаимнооднозначном пространственном преобразовании. Один и тот же граф может быть изображен различными способами: вершины можно располагать в произвольном порядке, а соединяющие их ребра (дуги) проводить в виде прямых или ломаных линий. Вместе с тем независимо от способа изображения, информация, содержащаяся в графе, остается одной и той же. Два графа будем называть *изоморфными*, если они имеют одинаковое число вершин, если каждой паре вершин, соединенных ребром в одном графе, соответствует такая же пара вершин, которые соединены ребром в другом графе.

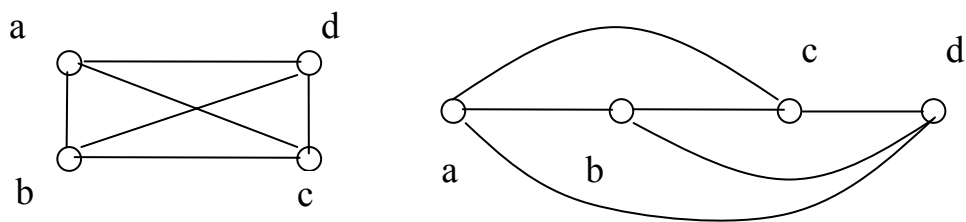


Рис. 5.4. Исходный граф и изоморфный ему граф

Представление графов с помощью матриц

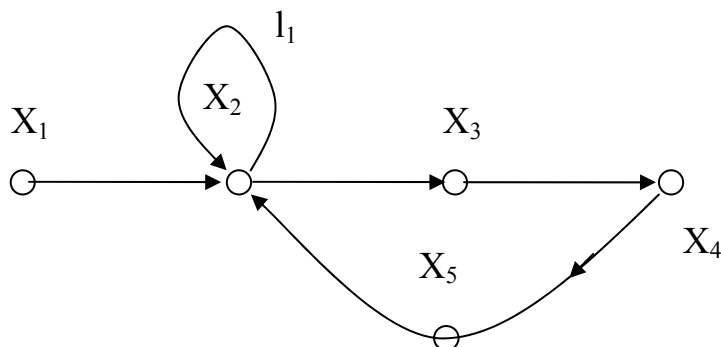
Информация, содержащаяся в графе, может быть представлена в алгебраическом виде посредством матриц.

Матрицей смежности, соответствующей некоторому графу $G=(X,Y)$, который состоит из n вершин X_i ($i=1,2,\dots,n$), называется матрица $[H]$ порядка $(n \times n)$ с элементами :

$h_{ij}=0$, если вершина x_j не связана дугой с вершиной x_i ;

$h_{ij}=1$, если вершина x_j связана дугой с вершиной x_i .

Например, матрица графа



имеет следующий вид:

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

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

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

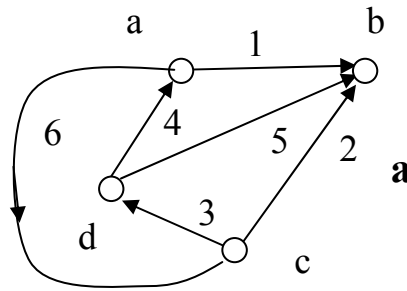
$S_{ij}=-1$, если дуга q_j выходит из вершины k_i ;

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

$S_{ij}=0$, если дуга q_j неинцидентна вершине k_i .

Матрицу $[S]$ называют также *структурной матрицей* графа.

Для графа



имеем:

$$[S_i] = \begin{matrix} & \begin{matrix} j \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{matrix} \\ \begin{matrix} i \\ a \\ b \\ c \\ d \end{matrix} & \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \end{matrix}$$

Свойства матриц инцидентий отражают топологические особенности соответствующих графов.

5.2. Характеристика и принципы построения топологических моделей ХТС

Потоковые графы

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

Выделяют три типа поточных графов: материальные, тепловые (энергетические) и параметрические.

Материальные поточные графы (МПГ) составляют по общему массовому расходу физических потоков или по массовому расходу некоторого химического компонента.

Вершины материального поточного графа по общему массовому расходу физических потоков (МПГО) соответствуют элементам ХТС, где меняется величина массового расхода, источникам и стокам веществ физических потоков. Дуги этого графа отвечают обобщенным материальным потокам.

Вершины материального поточного графа по массовому расходу некоторого химического компонента соответствуют элементам ХТС, транс-

формирующим массовые расходы химического компонента, источникам и стокам этого компонента в системе.

Вершины *теплового потокового графа* (ТПГ) соответствуют элементам системы, которые изменяют расходы тепла физических потоков, внешним и внутренним источникам и стокам тепла ХТС. Дуги теплового потокового графа отвечают обобщенным тепловым потокам.

Основные характерные особенности МПГО и ТПГ ХТС:

- 1) ориентированность, так как движение потоков вещества и энергии в системе происходит в строго определенном направлении;
- 2) асимметричность, потому что не все соседние элементы системы связаны между собой обратными технологическими потоками;
- 3) связность, так как все элементы в системе взаимосвязаны единой цепью потоков веществ или энергии.

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

Предположим, необходимо построить топологические модели для процесса синтеза аммиака, операторная схема которого представлена на рис.1.9. В операторе 1 происходит сжатие подаваемого потока сырья (азотоводородной смеси), в операторе 2 – его смешение с потоком непрореагировавшего сырья, уже побывавшего в реакторе, в операторах 3 и 4 – охлаждение азотоводородной смеси, в операторе 5 – выделение сконденсированного аммиака из азотоводородной смеси; в операторе 6 – химическое превращение; 7 - охлаждение водой, 8- отделение продукта – аммиака – от потока непрореагировавшего сырья, 9 – сжатие азотоводородной смеси.

Каждый i -й физический поток системы (для данной системы имеем 17 потоков) характеризуется набором следующих параметров: m_i - общий массовый расход физического потока; m_{ij} - массовый расход j -го компонента (в данном случае 3 компонента – аммиак, водород, азот) в i -м физическом потоке; c_{ij} - концентрация j -го компонента в i -м потоке; T_i - температура i -го потока; H_i - теплота физического потока.

Граф, отображающий общие материальные потоки между элементами приведенной системы, показан на рис. 5.5. Для построения графа взяты только те элементы системы, где меняется величина массового потока. Это и есть вершины графа.

В операторах 1, 3, 4, 6, 7, 9 не изменяются общие массовые расходы. (В операторах 1, 9 происходит изменение давления, в операторах 3, 4, 6, 7 –

температуры; в операторе 6 идет химическое превращение, меняются состав и температура потока, но общий массовый расход остается неизменным.) Поэтому на графе отсутствуют вершины, соответствующие перечисленным операторам. Но зато в нем должны быть отражены факты подачи сырья в систему и вывода продукта. Поэтому граф дополняется вершинами i , соответствующими источникам вещества, и вершинами s , отображающими сток вещества. Источник i соответствует общему количеству сырья, подаваемому в систему с потоком M_1 . Сток s_1 соответствует количеству продукта, выводимого из системы с потоком M_{14} ; s_2 - количеству аммиака, выводимому с потоком M_8 .

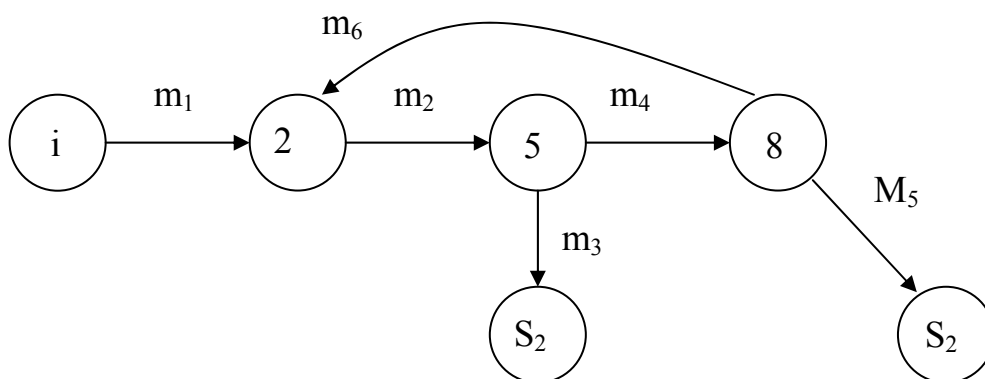


Рис. 5.5. Материальный потоковый граф по общим расходам ХТС

На рис. 5.6 приведен тепловой потоковый граф для рассматриваемой схемы. Помимо вершин графа, соответствующих операторам схемы, где трансформируются тепловые потоки, в граф введены вершины, соответствующие источникам и стокам теплоты.

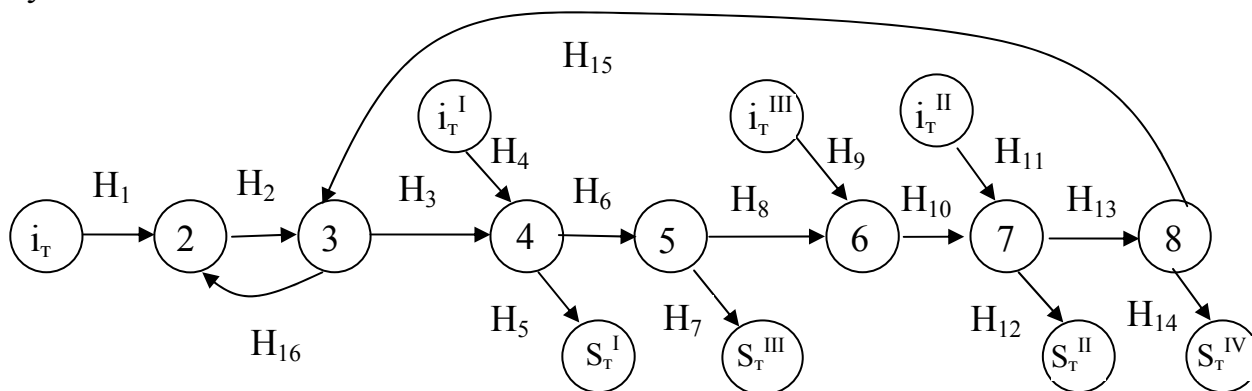


Рис. 5.6. Тепловой потоковый граф ХТС:

2-8 – номера вершин, соответствующие номерам операторов на операторной схеме, изображенной на рис.1.5; i_T , i_T^I , i_T^{II} – источники, соответствующие поступлению теплоты с физическими потоками M_1 , M_6 , M_{12} ; i_T^{III} – источник, соответствующий выделению теплоты при протекании экзотермической реакции; S_T^I , S_T^{II} , S_T^{III} , S_T^{IV} – стоки, соответствующие отводу теплоты с физическими потоками M_1 , M_3 , M_9 , M_{14} ; H_1 - H_{16} – тепловые потоки.

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

Дуги графа соответствуют физическим потокам системы. Каждой дуге ППГ сопоставлено некоторое неотрицательное число p_i – *параметричность* этой дуги, которое равно числу параметров соответствующего физического потока. В общем случае все дуги параметрического потокового графа сложной ХТС разнопараметричны.

Описанные выше материальные и тепловые потоковые графы отражают топологические особенности самих технологических систем. Но можно построить и такие графы, которые учитывают топологические особенности систем уравнений символической математической модели. Это *сигнальные графы*. Их строят для того, чтобы графически изобразить функциональные связи между информационными перемещениями, входящими в уравнения символической математической модели ХТС. Эти переменные называют *сигналами*, отсюда и название графа. Сигнальный граф соответствует системам уравнений математической модели ХТС и отражает функциональные или причинно-следственные связи между переменными ХТС.

Вершины сигнального графа соответствуют сигналам, т.е. информационным переменным ХТС (параметрам состояния и свойств системы). Вершины источники изображают независимые (свободные) переменные, вершины-стоки – зависимые переменные, относительно которых система уравнений разрешается в явном виде.

Дуги графа соответствуют коэффициентам или передаточным функциям, характеризующим связь между информационными переменными.

Помимо описанных существуют и другие разновидности графов. К другим подгруппам иконографических математических моделей относятся структурные блок-схемы и сетевые модели.

Структурная блок-схема – это иконографическая математическая модель, которая соответствует символической математической модели. На структурной блок-схеме каждый технологический оператор изображают в виде блока, подобного показанному на рис. 5.7.

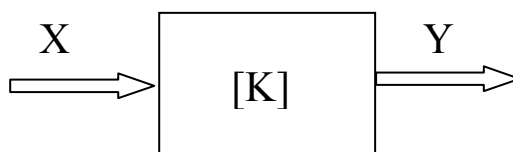


Рис. 5.7. Блок структурной блок-схемы:

X и Y – векторы параметров состояния входного и выходного технологических потоков; $[K]$ – набор коэффициентов передачи, представленный в виде матрицы

Каждый блок представляет математическую модель технологического оператора (набор коэффициентов передачи и передаточных функций) и связывает вектор параметров, являющихся входными для данного блока, с вектором выходных параметров. Блок-схема всей ХТС представляет тогда совокупность таких отдельных блоков, а связь между блоками осуществляется векторами параметров состояния соответствующих технологических потоков системы.

И структурные блок-схемы, и сигнальные графы отражают особенности символической математической модели. Между ними имеется взаимно однозначное соответствие: направленная ветвь блок-схемы отвечает вершине сигнального графа (в обоих случаях – это набор параметров состояния технологических потоков системы), а каждый блок схемы соответствует направленной ветви сигнального графа (в обоих случаях – это набор коэффициентов функциональной связи).

Сетевые модели – это иконографические модели, отображающие организационные процессы проектирования, эксплуатации и управления ХТС.

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ
ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Методические указания

*по выполнению лабораторных
работ по дисциплине*

Математические и компьютерные методы в химии и химической технологии

для студентов направления подготовки
18.03.01 Химическая технология
Направленность Химический инжиниринг и цифровые технологии

Ставрополь
2026

ВВЕДЕНИЕ

Современная химическая технология сталкивается с задачами, аналитическое решение которых зачастую либо чрезвычайно трудоемко, либо принципиально невозможно. Многие ключевые процессы (катализ, ректификация, синтез полимеров, гидродинамика многофазных сред) характеризуются высокой нелинейностью, взаимозависимостью десятков параметров и отсутствием полных априорных физико-химических моделей. В этих условиях традиционные методы математического моделирования, основанные на системе дифференциальных уравнений, часто требуют компромиссов и упрощений, снижающих их прогностическую ценность.

Альтернативой и мощным дополнением к классическому подходу выступают методы искусственных нейронных сетей (ИНС). Нейросетевые модели, относящиеся к классу «черного ящика», позволяют восстанавливать сложнейшие зависимости между входными переменными (температура, давление, концентрация реагентов, время пребывания) и целевыми параметрами (селективность, конверсия, вязкость, молекулярно-массовое распределение), используя только исторические или экспериментальные данные. Такой подход не требует детального знания механизма химических реакций, а эффективно обучается на прецедентах.

Целью данного методического пособия является формирование у студентов химических специальностей прикладных компетенций в области нейросетевого моделирования технологических процессов. В отличие от классических курсов по Data Science, здесь акцент делается на химико-технологическую специфику: работу с шумными экспериментальными данными, учет дрейфа катализатора, интерпретацию «черного ящика» с точки зрения законов сохранения массы и энергии, а также валидацию моделей на границах технологического регламента.

В пособии рассматриваются следующие ключевые вопросы:

- Типовые архитектуры нейронных сетей (многослойный перцептрон, сети радиальных базисных функций) и их обоснованный выбор для задач химической технологии.
- Этапы построения нейросетевой модели: от сбора и предобработки данных (нормализация, фильтрация выбросов) до обучения, предотвращения переобучения (overfitting) и тестирования.
- Сравнительный анализ нейросетевого и регрессионного (например, МНК) подходов на реальных химических процессах.

Инженерные аспекты использования обученной модели: прогнозирование выхода продукта, оценка состояния реактора в реальном времени, «мягкие» датчики (soft sensors) для ненаблюдаемых параметров. Практические примеры, приведенные в пособии, ориентированы на среду Python с использованием библиотек TensorFlow/Keras или PyTorch. Каждый лабораторный кейс сопровождается химическим смыслом: например, моделирование кинетики гидролиза, прогнозирование температуры в экзотермическом реакторе или оптимизация состава сырья для процесса полимеризации. Методическое пособие предназначено для студентов, магистрантов и аспирантов, обучающихся по направлению «Химия», «Химическая технология» и «Фундаментальная и прикладная химия», и предполагает базовое знакомство с высшей математикой (линейная алгебра, основы матанализа) и начальный уровень владения языком Python. Знание теории нейронных сетей не требуется — все необходимые концепции вводятся последовательно, с акцентом на практическое применение в лабораторной и промышленной химии.

Каждая работа содержит реальный технологический датасет (кинетика, хроматография, показания датчиков). Вы проходите полный цикл: предобработка → выбор архитектуры сети → обучение → анализ. В шаблоне кода на Python все операции поясняются в терминах химика-технолога.

Введение в нейросетевое моделирование химико-технологических процессов

Лабораторная работа №1. Знакомство со стеком Python для нейросетевого моделирования. Подготовка химических данных.

Установка и настройка среды: Anaconda / Google Colab / Jupyter Notebook. Обзор библиотек: NumPy, Pandas, Matplotlib, Scikit-learn, TensorFlow/Keras.

Импорт и первичный анализ технологического датасета (например, результаты лабораторного реактора: время, температура, pH, концентрация реагентов, выход продукта).

Выявление пропусков, выбросов (метод «трёх сигм», ящик с усами). Нормализация и стандартизация данных. Разделение выборки на обучающую, валидационную и тестовую.

Результат: подготовленный и размеченный датасет для обучения первой нейросетевой модели.

1. Цель работы

Освоить базовые инструменты обработки экспериментальных и технологических данных в Python, подготовить датасет для последующего нейросетевого моделирования.

2. Краткие теоретические сведения

Любая нейросетевая модель критически зависит от качества входных данных. Химические данные имеют свои особенности:

Пропуски (отказ датчика, потеря пробы);

Выбросы (лабораторная ошибка, залповый выброс);

Разные масштабы (температура 100–500°C, давление 1–50 атм, концентрации 0.001–10 моль/л);

Мультиколлинеарность (давление и температура не независимы).

Этапы предобработки:

Импорт данных (csv, Excel, ручной ввод).

Визуализация (гистограммы, ящики с усами, scatter-матрицы).

Очистка: удаление или интерполяция пропусков, фильтрация выбросов (метод z-оценки, межквартильный размах).

Нормализация (MinMaxScaler, StandardScaler) — обязательна для градиентных методов.

Разделение на выборки: train (70%), validation (15%), test (15%).

3. Оборудование и ПО

ПК с доступом в Интернет;

Google Colab / Jupyter Notebook / VS Code;

Библиотеки: pandas, numpy, matplotlib, seaborn, scikit-learn.

4. Порядок выполнения

Часть 1. Загрузка данных

Скачать предоставленный датасет «Данные лабораторного реактора синтеза аммиака» (файл reactor_data.csv). Столбцы:

T — температура, °C;

P — давление, атм;

tau — время пребывания, с;

cat_activity — активность катализатора (отн. ед.);

NH3_out — объёмная доля аммиака на выходе, % (целевой параметр).

Загрузить данные в pandas.DataFrame. Вывести первые 5 строк и статистику .describe().

Часть 2. Первичный анализ и очистка

3. Построить гистограммы всех признаков и ящики с усами (boxplot). Визуально определить выбросы.

4. Рассчитать z-оценки для каждого числового столбца. Удалить строки, где $|z| > 3$.

5. Обнаружить пропуски (.isnull().sum()). Если пропусков <5% — удалить строки, иначе заполнить медианой по столбцу или интерполировать.

Часть 3. Нормализация и разделение

6. Отделить входные признаки (X) от целевой переменной (y).

7. Применить StandardScaler (приведение к среднему 0 и дисперсии 1) из sklearn.preprocessing. Сохранить параметры scaler — они понадобятся для новых данных.

8. Разделить выборку на train/test с помощью train_test_split. Затем из train выделить validation (80/20 от train).

Часть 4. Сохранение и отчёт

9. Сохранить обработанные выборки в форматы CSV/NumPy.

10. Подготовить отчёт с графиками «До/После» очистки и нормализации.

5. Содержание отчёта

Титульный лист.

Код с комментариями.

Скриншоты исходных и обработанных данных, графики.

Химико-технологический комментарий: «Наиболее вероятная причина выброса — ошибка хроматографа при превышении верхнего предела детекции».

6. Контрольные вопросы

Почему нейронные сети чувствительны к масштабу входных данных?

Что такое выброс (аномалия) в контексте химического эксперимента?

В чём разница между StandardScaler и MinMaxScaler? Когда какой предпочтительнее?

Зачем нужна валидационная выборка отдельно от тестовой?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №2. Реализация и обучение однослойного перцептрона для прогнозирования выхода химической реакции.

1. Цель работы

Познакомиться с простейшей архитектурой нейронной сети (однослойный перцептрон) и применить её для регрессии — прогнозирования выхода продукта по параметрам реакции.

2. Краткие теоретические сведения

Формальный нейрон вычисляет взвешенную сумму входов, прибавляет смещение (bias) и пропускает через нелинейную функцию активации:

однослойный перцептрон — сеть из одного слоя таких нейронов. Для регрессии в выходном слое обычно используют линейную активацию (без нелинейности).

Обучение — минимизация функции потерь (например, среднеквадратичная ошибка MSE) с помощью градиентного спуска.

Пошагово:

Прямой проход: вычисление предсказания.

Расчёт ошибки. Обратное распространение: градиенты по весам.

Обновление весов:

Гиперпараметры (задаются до обучения): число нейронов, скорость обучения (η), число эпох, размер батча.

3. Порядок выполнения

Часть 1. Загрузка и подготовка данных

Использовать очищенный датасет из ЛР №1 (или новый датасет «Гидролиз сложных эфиров»).

Убедиться, что данные нормализованы.

Часть 2. Создание модели в Keras

3. Импортировать tensorflow.keras.

4. Создать модель Sequential с одним плотным слоем.

Вывести структуру модели: .summary().

Часть 3. Обучение и визуализация

6. Обучить модель с разделением на train/validation:

```
history = model.fit(X_train, y_train,  
                    validation_data=(X_val, y_val),  
                    epochs=100, batch_size=16, verbose=1)
```

Часть 4. Анализ

9. Вычислить предсказания: $y_{pred} = model.predict(X_{test})$.

10. Построить график «предсказание vs реальность». Добавить линию идеального совпадения $y=x$.

11. Рассчитать R^2 (коэффициент детерминации). Сделать вывод: достаточно ли одного слоя для описания процесса.

Химико-технологический вывод (пример)

Для реакции гидролиза модель достигла $R^2 = 0.72$ на тесте. Ошибка на нестационарных режимах выше (первые минуты после подачи катализатора). Один слой нейронов не захватывает кинетические особенности — требуется более глубокая сеть (ЛР №3).

5. Контрольные вопросы

Что такое градиентный спуск? Зачем нужна скорость обучения?

Чем отличается MSE от MAE? Когда что использовать?

Почему в регрессии на выходе линейная активация, а не сигмоида?
Что означает «переобучение»? Как его заметить по графикам?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №3. Многослойный перцептрон (MLP) для моделирования кинетики сложной реакции

1. Цель работы

Построить глубокую нейронную сеть (MLP) для прогнозирования концентрации реагента во времени в сложной реакции (многостадийной, с параллельными/последовательными стадиями). Сравнить с классическим кинетическим моделированием.

2. Краткие теоретические сведения

Многослойный перцептрон содержит 1–5 скрытых слоёв с нелинейными активациями (ReLU, tanh). Увеличение глубины позволяет аппроксимировать более сложные функции — например, кинетическую кривую с несколькими характерными временами.

Регуляризация для борьбы с переобучением:

Dropout — случайное отключение нейронов во время обучения.

L1/L2 — добавление штрафа на веса.

Early stopping — остановка, когда val_loss перестаёт улучшаться.

Сравнение с аналитической моделью:

Если известен механизм $A \rightarrow B \rightarrow C$, решают систему ОДУ численно. Нейросеть не знает механизма, но может подогнуть выходную кривую по данным. Плюс: не нужны константы скоростей. Минус: нет экстраполяции за пределы данных.

3. Порядок выполнения

Часть 1. Датасет кинетики:

Скачать файл kinetics_data.csv (реакция омыления этилацетата при разных температурах). Столбцы: t (время, мин), T (температура, °C), C_A (концентрация исходного эфира, моль/л) — целевая переменная.

Нормализовать. Разделить на train/test по разным температурам (например, train: 25°C и 35°C, test: 30°C и 40°C) — проверить экстраполяцию.

Часть 2. Построение MLP 3. Создать модель:

```
model = Sequential([
    Dense(64, activation='relu', input_dim=X.shape[1]),
    Dropout(0.2),
    Dense(32, activation='relu'),
    Dropout(0.2),
```

```
Dense(16, activation='relu'),  
Dense(1, activation='linear')  
)  
model.compile(optimizer='adam', loss='mse', metrics=['mae'])
```

Использовать EarlyStopping (patience=10) и ReduceLROnPlateau.

Часть 3. Обучение и сравнение с кинетической моделью

5. Обучить MLP. Построить предсказанные кинетические кривые $C(t)$ для разных температур.

6. Для тех же данных подобрать параметры кинетической модели:

Для реакции 1-го порядка: $CA = CA_0 \cdot e^{-kt}$, подобрать k .

Вычислить MSE для обеих моделей на тестовых температурах.

Часть 4. Анализ

7. На каких режимах нейросеть ошибается сильнее? (При высоких температурах, где нет данных).

8. Оценить время счёта: MLP выдаёт прогноз за миллисекунды, численное решение ОДУ — за секунды. Записать сравнение.

4. Химико-технологический вывод

MLP с двумя скрытыми слоями превосходит кинетическую модель первого порядка на данных внутри интервала температур 25–35°C (MSE = 0.012 vs 0.041). Однако при экстраполяции на 40°C нейросеть ошибается сильнее, что типично для data-driven моделей. Рекомендуется использовать MLP для оперативного контроля в рабочем диапазоне, а для поиска новых режимов — комбинировать с физической моделью.

5. Контрольные вопросы

Зачем в скрытых слоях нужны нелинейные активации (ReLU, tanh)?

Что такое Dropout и почему он не используется при инференсе?

В каком случае нейросетевой подход предпочтительнее классической кинетики? А в каком — наоборот?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №4. Свёрточные нейронные сети (CNN)
для обработки спектральных и хроматографических данных

1. Цель работы

Освоить применение одномерных свёрточных нейронных сетей для количественного анализа по ИК-спектрам или хроматограммам.

2. Краткие теоретические сведения

Свёртка (convolution) — скользящее окно (ядро) перемножает свои веса с фрагментом входного сигнала и суммирует результат. Позволяет автоматически выделять локальные признаки: пики, плечи, шум.

Архитектура CNN для 1D-сигналов:

Вход: вектор отсчётов (например, интенсивность по длине волны).

Conv1D слой → ReLU → MaxPooling1D (снижение размерности).

Несколько таких блоков.

Полносвязные слои в конце.

Преимущество над классическим анализом: не нужно вручную выбирать аналитические пики или базовую линию — сеть сама научается выделять информативные участки спектра.

3. Порядок выполнения

Часть 1. Загрузка спектральных данных:

Датасет `ir_spectra.csv`: 1000 образцов смеси этанол/вода/метанол. Каждая строка — ИК-спектр (200 точек от 4000 до 400 cm^{-1}). Последние три столбца — истинные концентрации компонентов.

Цель: построить модель для предсказания концентрации этанола.

Вход: `X.shape = (N, 200, 1)` — добавить канал для Conv1D.

Часть 2. Построение 1D CNN

```
model = Sequential([
    Conv1D(32, kernel_size=5, activation='relu', input_shape=(200,1)),
    MaxPooling1D(pool_size=2),
    Conv1D(64, kernel_size=5, activation='relu'),
    MaxPooling1D(pool_size=2),
    Flatten(),
    Dense(64, activation='relu'),
    Dense(1) # концентрация этанола])
model.compile(optimizer='adam', loss='mse')
```

Обучить. Построить график реальной концентрации против предсказанной.

Часть 3. Сравнение с традиционным методом (MLR)

5. Традиционный подход: выделить площадь пика при $\sim 1050 \text{ cm}^{-1}$ (C–O).

Построить линейную калибровку методом наименьших квадратов.

6. Сравнить R^2 и RMSE на тестовой выборке.

Часть 4. Визуализация признаков

7. Взять обученную свёртку. Извлечь веса ядра первого слоя.

Визуализировать, как оно «проходит» по спектру — какие участки наиболее значимы.

8. Сравнить с известными полосами поглощения этанола.

4. Химико-технологический вывод:

CNN автоматически сфокусировалась на области $1000\text{--}1100\text{ см}^{-1}$, что соответствует валентным колебаниям C–O. В отличие от простого МНК по одному пику, сеть также учла область $\sim 1600\text{ см}^{-1}$ (фон воды), что улучшило точность на образцах с высокой влажностью. CNN-RMSE = 0.31%, MLR-RMSE = 0.57%.

5. Контрольные вопросы

Почему свёрточные сети эффективны для анализа спектров и хроматограмм?

Что такое pooling? Зачем он нужен?

Как определить, какие участки спектра сеть считает важными?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №5. Объяснимый искусственный интеллект (XAI) для химика-технолога. Интерпретация «чёрного ящика»

1. Цель работы

Научиться интерпретировать обученную нейросетевую модель — определять, какие входные параметры и как влияют на прогноз. Подтвердить или опровергнуть соответствие модели физико-химическим закономерностям.

2. Краткие теоретические сведения

Нейронные сети часто критикуют как «чёрные ящики». XAI (Explainable AI) предоставляет инструменты, чтобы понять логику модели.

Популярные методы:

Permutation Importance — перемешиваем один входной признак и смотрим, как падает качество. Сильное падение → признак важен.

Partial Dependence Plots (PDP) — фиксируем все признаки, кроме одного, варьируем его и смотрим изменение предсказания. Показывает направление и форму зависимости (линейная, пороговая, немонотонная).

SHAP (SHapley Additive exPlanations) — каждому признаку приписывается вклад в конкретное предсказание. Сумма вкладов плюс базовое значение равна предсказанию. Позволяет объяснить, почему для *этого конкретного образца* нейросеть дала такой результат.

3. Порядок выполнения

Часть 1. Обучение модели-кандидата

Использовать датасет «Каталитический крекинг» (параметры: температура, давление, расход сырья, концентрация никеля на катализаторе; целевая переменная — выход бензина).

Обучить MLP (2–3 слоя) до приемлемой точности ($R^2 > 0.85$ на тесте).

- | Часть | 2. | Permutation | Importance |
|-------|--|-------------|------------|
| 3. | Импортировать <code>from sklearn.inspection import permutation_importance</code> . | | |
| 4. | Вычислить важность признаков. Построить горизонтальную столбчатую диаграмму. | | |
| 5. | Сделать вывод: какой параметр наиболее критичен? Совпадает ли это с интуицией технолога? | | |

- | Часть | 3. | Partial | Dependence | Plots | (PDP) |
|-------|-----|---------|------------|-----------|-------|
| 6. | Для | топ-2 | признаков | построить | PDP |
- (библиотека `PDPBox` или `sklearn.inspection.PartialDependenceDisplay`).

7. Проанализировать форму зависимости:

Линейная → модель уловила прямую связь.

Плато + резкий спад → возможно, пороговый эффект (например, дезактивация катализатора выше 520°C).

Сравнить с известной из литературы зависимостью (привести ссылку).

Часть	4.	SHAP-анализ
-------	----	-------------

9. Установить `shap`. Вычислить SHAP-значения для тестовой выборки.

10. Построить:

Summary plot — показывает распределение влияния каждого признака.

Waterfall plot для 2–3 конкретных наблюдений (например, «почему для пробы №42 выход низкий, несмотря на высокую температуру?»).

Сформулировать вывод: модель логична или противоречит химии («сеть выучила, что снижение давления снижает выход — физически верно, но она также приписала важность мнимой корреляции с порядковым номером эксперимента — артефакт»).

4. Химико-технологический вывод

Permutation importance подтвердила ожидаемый факт: температура (0.48) и закоксовывание катализатора (0.31) — главные факторы. PDP показала, что модель считает оптимальную температуру 510–520°C, что согласуется с литературными данными для цеолитсодержащих катализаторов. SHAP-анализ выявил, что в образцах с высоким содержанием серы модель систематически ошибается — это указывает на необходимость добавить концентрацию серы как входной признак.

5. Контрольные вопросы

Почему даже хорошая по точности модель может быть опасна для внедрения?

В чём разница между глобальной интерпретацией (PDP, важность признаков) и локальной (SHAP для одного образца)?

Что означает положительное/отрицательное SHAP-значение для признака?

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА №6. Оптимизация технологического режима и «мягкие датчики» (soft sensors) на основе нейросетевых моделей

1. Цель работы

Научиться использовать обученную нейросетевую модель для двух прикладных задач: поиск оптимальных технологических параметров и создание виртуального датчика для трудноизмеряемого параметра.

2. Краткие теоретические сведения

Суррогатная оптимизация — вместо сложного (или не существующего в явном виде) физико-химического процесса используем нейросеть, которая быстро вычисляет выход. Алгоритм:

Обучить нейросеть на исторических данных.

Задать целевую функцию (например, максимум выхода продукта).

Перебрать комбинации входных параметров (Grid Search, Random Search или Байесовская оптимизация) на суррогате.

Найденный оптимум проверить (если возможно) на реальной установке.

Soft sensor («мягкий датчик») — прогнозная модель, которая оценивает трудноизмеряемый параметр in-situ по легкоизмеряемым. Примеры:

Вязкость полимера по температуре реактора и моменту на мешалке.

Содержание целевого компонента по данным рамановского спектрометра (аппаратура дорогая, а soft sensor — бесплатно).

Степень закоксовывания катализатора по перепаду давления.

Оценка неопределённости — нейросеть выдаёт точечное предсказание. Для принятия решений нужно знать доверительный интервал. Метод Monte Carlo Dropout: включаем Dropout и на этапе предсказания делаем 100 прогонов → получаем распределение.

3. Порядок выполнения

Часть 1. Суррогатная оптимизация режима реакции (2.5 часа)

Использовать обученную ранее MLP-модель кинетики (ЛР №3) или датасет «Реактор полимеризации этилена».

Задать ограничения: $T=150-220^{\circ}\text{C}$, $P=10-30\text{атм}$, $[C_2H_4]=5-15\text{моль/л}$, $T=150-220^{\circ}\text{C}$, $P=10-30\text{атм}$, $[C_2H_4]=5-15\text{моль/л}$. Цель: максимизировать производительность (кг/час).

Реализовать перебор по сетке (Grid Search) с шагом, а затем Random Search для уточнения.

Визуализировать ландшафт целевой функции (contour plot температуры и давления при фиксированной концентрации).

Выдать рекомендованный режим $(T^*, P^*, [C_2H_4]^*)(T^*, P^*, [C_2H_4]^*)$.

Часть 2. Разработка soft sensor для вязкости расплава

6. Датасет `soft_sensor.csv`: легкоизмеряемые параметры (температура корпуса экструдера, давление расплава перед фильерой, частота вращения шнека, потребляемая мощность). Целевой параметр — вязкость (отбор пробы + реометрия каждые 30 минут).

7. Обучить MLP прогнозировать вязкость по «быстрым» переменным.

8. Оценить точность: сравнить предсказанную вязкость с лабораторными измерениями на отложенной выборке.

Часть 3. Оценка неопределённости

9. Реализовать Monte Carlo Dropout:

В обученной модели оставить Dropout слои (обычно их отключают при `predict`).

Сделать `model.predict(X_test, verbose=0)` 100 раз, собрать результаты.

Вычислить среднее и стандартное отклонение для каждого прогноза.

Построить график: предсказание $\pm 2\sigma$ и реальная вязкость. Отметить образцы, где реальное значение выходит за пределы 95% интервала — они могут быть аномалиями или требуют переобучения.

4. Химико-технологический вывод

Суррогатная оптимизация предлагает повысить температуру до 218°C и давление до 27 атм, что обещает прирост производительности на 14% по сравнению с текущим режимом. Рекомендуется провести пробный пуск на этом режиме с мониторингом безопасности. Soft sensor для вязкости достиг $MAE = 0.23 \text{ Па}\cdot\text{с}$, что сопоставимо с погрешностью лабораторного реометра. Интервалы неопределённости позволяют исключить 3% образцов как потенциальные выбросы. Предлагается внедрить soft sensor в SCADA-систему для непрерывного контроля качества.

5. Контрольные вопросы

Почему суррогатная оптимизация на нейросети быстрее, чем на физической модели? Где может быть опасность?

В чём преимущество soft sensor перед дорогим анализатором?

Почему Monte Carlo Dropout даёт неопределённость, а просто предсказание — нет?

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«СЕВЕРО-КАВКАЗСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Методические указания

*по организации самостоятельной работы
по дисциплине*

***Математические и компьютерные методы в химии и химической
технологии***

для студентов направления подготовки
18.03.01 Химическая технология

Направленность Химический инжиниринг и цифровые технологии

Ставрополь 2026 г.

Общие положения

Самостоятельная работа студентов по дисциплине «Нейросетевое моделирование технологических процессов» направлена на закрепление и углубление знаний, полученных на лекционных и лабораторных занятиях, а также на формирование устойчивых навыков применения нейросетевых методов для решения реальных химико-технологических задач.

Цели СРС:

Закрепление и углубление теоретических знаний.

Формирование практических навыков (работа с литературой, расчеты, анализ данных).

Развитие познавательной активности и ответственности.

Подготовка к текущему контролю и экзаменам.

Методика работы с литературой

Для эффективной работы с текстами используйте алгоритм PQ3R (Preview — Question — Read — Recite — Review):

- Просмотр (Preview): бегло изучите оглавление, введение, резюме.
- Вопрос (Question): сформулируйте, что вы хотите узнать из этого текста.
- Чтение (Read): внимательно читайте, делая пометки карандашом.
- Пересказ (Recite): после параграфа закройте книгу и перескажите суть своими словами.
- Повторение (Review): через день пролистайте конспект, восстановите логику.

Подготовка к практическим и лабораторным занятиям

Алгоритм подготовки:

Уточните тему и вопросы к занятию (обычно в РПД).

Найдите соответствующие разделы в учебнике / лекции.

Прочитайте, составьте краткий конспект (опорный сигнал, схему).

Если заданы задачи – решите 2–3 аналогичных из методички.

Сформулируйте вопросы, которые остались непонятными.

Реферат

Этап 1. Выбор и формулировка темы

Тема должна быть узкой.

Проверьте: по теме есть не менее 5–7 источников (книг, статей) за последние 10 лет.

Этап 2. Поиск и отбор литературы

Источники по убыванию надежности:

Учебники и учебные пособия с грифом УМО.

Монографии и сборники научных статей.

Статьи из рецензируемых журналов (ВАК, РИНЦ).

Авторефераты диссертаций.

Не рекомендуется: Википедия, студенческие рефераты с сайтов, непроверенные блоги.

Как искать:

Ключевые слова + «site:elibrary.ru», «site:cyberleninka.ru», Google Книги.

Библиотечный каталог вуза.

Этап 3. Составление рабочего плана

Пример плана реферата по гуманитарной дисциплине:

Введение (1–2 стр.)

Актуальность темы (почему это важно сейчас).

Цель и задачи (3–5 задач).

Обзор использованных источников.

Глава 1. Теоретические аспекты проблемы (3–5 стр.)

1.1. Определение ключевых понятий.

1.2. История изучения вопроса.

Глава 2. Анализ конкретного материала (4–6 стр.)

2.1. Примеры, данные, таблицы.

2.2. Сравнение точек зрения разных авторов.

Заключение (1–2 стр.)

Выводы по каждой задаче.

Практические рекомендации (если есть).

Список литературы (10–20 источников).

Этап 4. Написание черновика

Не редактируйте сразу – пишите быстро, фиксируя главное.

Каждый абзац – одна мысль. Объем абзаца – 3–7 строк.

Прямое цитирование заключайте в кавычки и указывайте страницу:

Как отмечает Иванов И.И., «образование – это...» [7, с. 45].

Пересказ своими словами также требует ссылки: По мнению Петрова П.П., ключевым фактором является... [3, с. 12–15].

Этап 5. Оформление по ГОСТ (кратко)

Шрифт: Times New Roman, 14 кегль.

Интервал: 1,5.

Поля: левое – 30 мм, правое – 15 мм, верх/низ – 20 мм.

Отступ красной строки: 1,25 см.

Нумерация страниц: внизу по центру, начиная с титульного листа (на титуле номер не ставится).

Заголовки: полужирный, по центру, без точки в конце.

Ссылки на литературу: квадратные скобки с номером источника из списка.
Список литературы – в алфавитном порядке.

Этап 6. Проверка на антиплагиат (если требуется)

Уникальность не менее 50–70% (в зависимости от вуза).

Чтобы повысить уникальность: переформулируйте общие места, заменяйте синонимами, меняйте структуру предложений.

Запрещено: технические ухищрения (замена букв кириллицей, микрошрифты)
– система их видит.

Чек-лист готового реферата

Титульный лист (название вуза, тема, ФИО, группа, год).

Оглавление (с номерами страниц).

Введение, основная часть, заключение.

Ссылки в тексте на все заимствованные идеи.

Список литературы (минимум 8 источников).

Проверка орфографии (F7 в Word).

Файл назван: *Реферат_Иванов_БУ-22_Финансы.doc*.

ВОПРОСЫ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОГО КОНТРОЛЯ

Уровень 1. Базовый (знание терминов и определений)

Дайте определение нейросетевого моделирования технологического процесса.

Чем нейросетевая модель отличается от традиционной регрессионной или детерминированной модели (например, основанной на дифференциальных уравнениях)?

Назовите три основных типа архитектур нейронных сетей, наиболее часто применяемых для моделирования технологических процессов.

Что такое «обучающая выборка» и «тестовая выборка» применительно к технологическому процессу? Каким должно быть их типичное соотношение?

Какие параметры технологического процесса обычно выступают в качестве входов нейросети, а какие – в качестве выходов?

Что такое «переобучение» (overfitting) нейросетевой модели и почему оно особенно опасно для моделирования технологических процессов?

Какие функции активации чаще всего используются в скрытых слоях (ReLU, tanh, sigmoid) и в выходном слое (линейная, softmax) для задач регрессии и классификации состояний процесса?

Что означают метрики MSE, MAE, R^2 при оценке качества нейросетевой модели техпроцесса?

Каким образом нейросетевая модель может учитывать динамику процесса (запаздывания, переходные режимы)?

Перечислите не менее трех программных инструментов (библиотек, сред), используемых для нейросетевого моделирования технологических процессов.

Уровень 2. Продвинутый (анализ, сравнение, оценка рисков)

В каком случае нейросетевое моделирование технологического процесса предпочтительнее физико-химического?

Каковы основные ограничения «черного ящика» (black box) для технологического процесса с точки зрения инженерной безопасности?

Какой объем данных (примерно) считается минимальным для обучения многослойной нейросети, моделирующей технологический процесс с 10 входами и 3 выходами?

Сравните подходы: обучение с учителем (supervised) и без учителя (unsupervised) при анализе отказов оборудования. Какой и когда применим?

Что такое «дрейф концепции» (concept drift) в технологическом процессе и как часто нужно переобучать нейросетевую модель?

Как проверить, что нейросеть не просто запомнила обучающие примеры, а действительно обобщила закономерности процесса?

Каким образом обрабатываются пропуски данных (missing values) в датчиках технологического процесса перед подачей в нейросеть?

Почему для моделирования взрывоопасных или химических процессов недостаточно одной метрики MSE и необходим анализ остатков (residuals)?

Что такое «гибридное моделирование» (нейросеть + физические уравнения) и в каких случаях оно оправдано?

Какой архитектурой (CNN, RNN, трансформер) целесообразно моделировать процесс с сильными временными зависимостями (например, ректификационная колонна) и почему?

Уровень 3. Практический (задачи, ситуации, кейсы)

Задача на выбор архитектуры:

Технологический процесс – прокатка металла. Датчики фиксируют температуру, давление, скорость прокатки, толщину заготовки каждые 0,1 секунды. Нужно предсказать качество готового листа через 5 секунд.

Вопрос: какой тип нейросети (FFNN, RNN, LSTM, CNN 1D) вы выберете и почему?

Задача на обнаружение переобучения:

Вы обучили нейросетевую модель процесса агломерации руды. На обучающей выборке $MSE = 0,002$, на тестовой $MSE = 0,45$.

Вопрос: о чем это говорит? Предложите три способа исправить ситуацию.

Ситуация (нормировка данных):

Входные параметры: температура (800–1200 °C), расход реагента (0,1–0,5 кг/с), концентрация (0,1–10 %).

Вопрос: нужно ли нормировать данные? Если да, то какой метод нормировки (min-max, z-score) примените и почему?

Кейс (дефицит данных):

Процесс редкий (аварийные ситуации). Всего 50 записей аварийного режима и 10 000 записей нормального режима.

Вопрос: как построить нейросетевую модель детекции аварий? Какие методы борьбы с дисбалансом классов предложите?

Задача на разделение выборки:

У вас есть данные непрерывного технологического процесса за 30 суток с частотой 1 Гц.

Вопрос: корректно ли перемешивать все наблюдения случайным образом перед разбиением на обучение/валидацию/тест? Если нет, то как правильно разбить временной ряд?

Ошибка моделирования:

Нейросеть на тестовой выборке показывает $R^2 = 0,98$, но при внедрении на реальную установку ошибка прогноза оказалась в 3 раза выше.

Вопрос: перечислите не менее трех возможных причин этого явления.

Инженерная интерпретация:

Скрытый слой нейросети, моделирующей процесс экструзии полимера, имеет 100 нейронов.

Вопрос: может ли технолог использовать эту модель для понимания физики процесса? Что предложите для повышения интерпретируемости?

Задача на выбор частоты дискретизации:

Процесс имеет постоянную времени 2 секунды. Датчики опрашиваются каждые 10 мс.

Вопрос: нужно ли прореживать данные? Сформулируйте критерий выбора шага дискретизации.

Кейс (обновление модели):

Модель работала полгода, но на прошлой неделе заменили катализатор на более активный.

Вопрос: достаточно ли просто продолжить дообучение (fine-tuning) на новых данных? Какие риски?

Проектная задача:

Сформулируйте этапы построения нейросетевой модели для прогнозирования износа режущего инструмента на токарном станке по данным вибрации, тока двигателя и акустической эмиссии. Какие признаки (features) из временных сигналов вы извлечете?

Рекомендуемая литература:

Панфилова Е. В. Нейросетевое моделирование производственных процессов в нанотехнологиях: учебно-методическое пособие. — М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2025. — 44 с. — ISBN 978-5-7038-6681-8.

Полковская М. Н. Нечеткая логика и нейронные сети: учебное пособие. — ИрГАУ, 2023. — 116 с.

Борисов В. В., Круглов В. В., Федулов А. С. Нечеткие модели и сети : учебное пособие. — 2-е изд., стер. — М.: Горячая линия-Телеком, 2012. — 284 с.

Муртазин Т. (ред.) Искусственный интеллект в задачах моделирования, управления, диагностики технологических процессов: монография. — М.; Вологда: Инфра-Инженерия, 2023. — 232 с. — ISBN 978-5-9729-1428-9.

Тырышкин С. Ю. Нейросетевая оптимизация в автоматизированных системах управления высокоразмерными технологическими процессами // Доклады ТУСУР. — 2025. — Т. 28, № 2. — С. 153–159. DOI: 10.21293/1818-0442-2025-28-2-153-159.

Андриевская Н. В., Резников А. С., Черняев А. А. Особенности применения нейро-нечетких моделей для задач синтеза систем автоматического управления // Фундаментальные исследования. — 2014. — № 11 (7). — С. 1445–1449.