Вычислительная математика

Теория и практика в среде MATLAB

Компьютерное моделирование химико-технологических процессов (ХТП)

- Системный анализ ХТП
- Построение систем уравнений математического описания ХТП
- Разработка и реализация расчётных модулей и моделирующих алгоритмов ХТП
- Идентификация математических моделей ХТП
- Оптимизация ХТП

Системный анализ ХТП

Для решения задач компьютерного моделирования применяется **системный подход**, в соответствии с которым ХТП рассматривается как некоторая функциональная система(объект), изучение которой осуществляется на различных иерархических уровнях.

Объект, являющийся совокупностью соединённых между собой аппаратов (химическое производство), в частности, для производства некоторого целевого продукта, называется **химико-технологической системой (ХТС)**

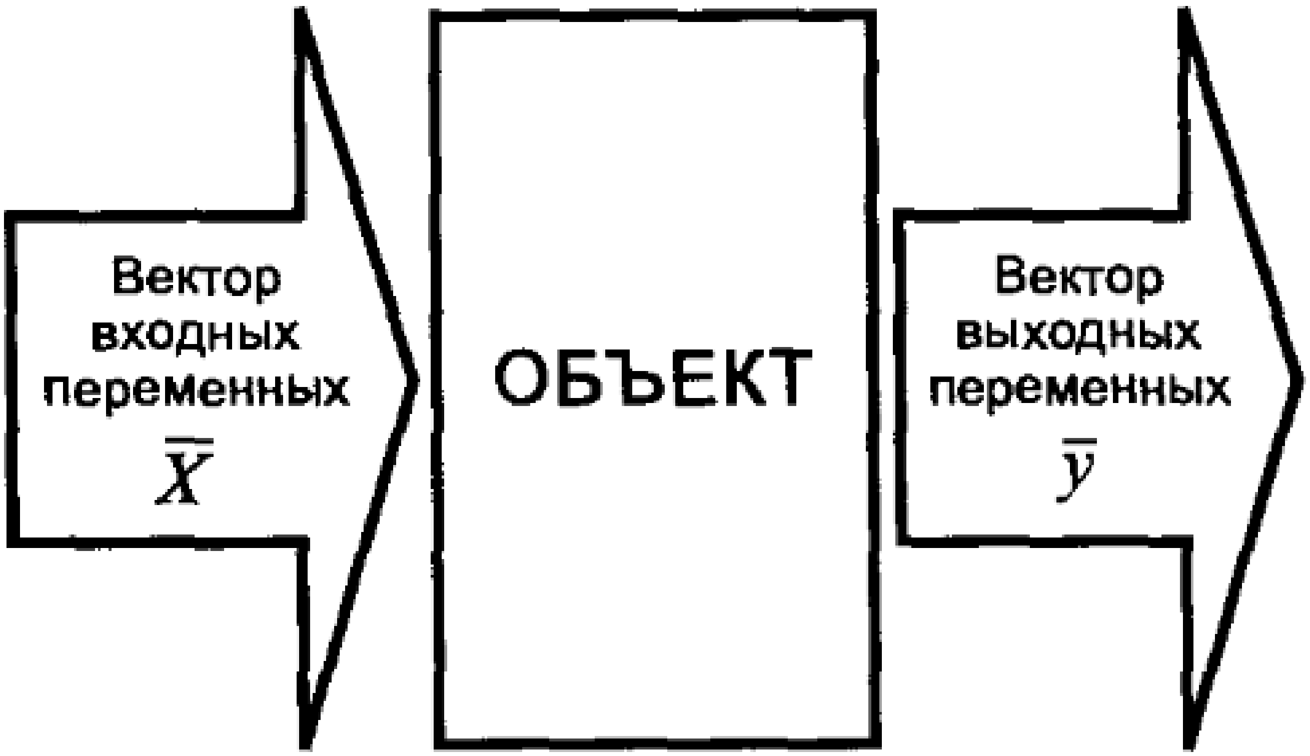


Рис. 1.1. Схематическое представление ХТП как функциональной системы

Входные переменные $\vec{X}$

- Собственно входные переменные, например, свойства перерабатываемого сырья – его расход, состав, температура
- Возмущающие переменные (их значения изменяются случайным образом во времени и по тем или иным причинам не могут быть измерены)
- Управляющие переменные (могут быть измерены и имеется возможность на них воздействовать в соответствии с требованиями)

Важнейший этап построения адекватной математической модели ХТС – анализ её структуры и **декомпозиция** сложной системы на более простые подсистемы в соответствии со следующими принципами:

- **определение иерархической структуры системы**, т.е. выделения её иерархических ступеней и взаимосвязей между ними на основе фундаментальных знаний, экспериментальных данных и опыта специалистов;
- **реализация принципа иерархической соподчинённости** при формализации знаний об изучаемых элементах системы и принятии разумных допущений, что выражается в учёте наиболее важных процессов, протекающих на низких ступенях иерархии системы и оказывающих влияние на процессы на верхних уровнях иерархии;

- **комплексное исследование отдельных процессов** с учётом влияния на них не только переменных рассматриваемого иерархического уровня, но и переменных других уровней (как низших, так и высших уровней).

Объект, представляющий собой один аппарат или секцию аппарата (типовой ХТП), в котором протекают физико-химические процессы, называется физико-химической системой (ФХС).

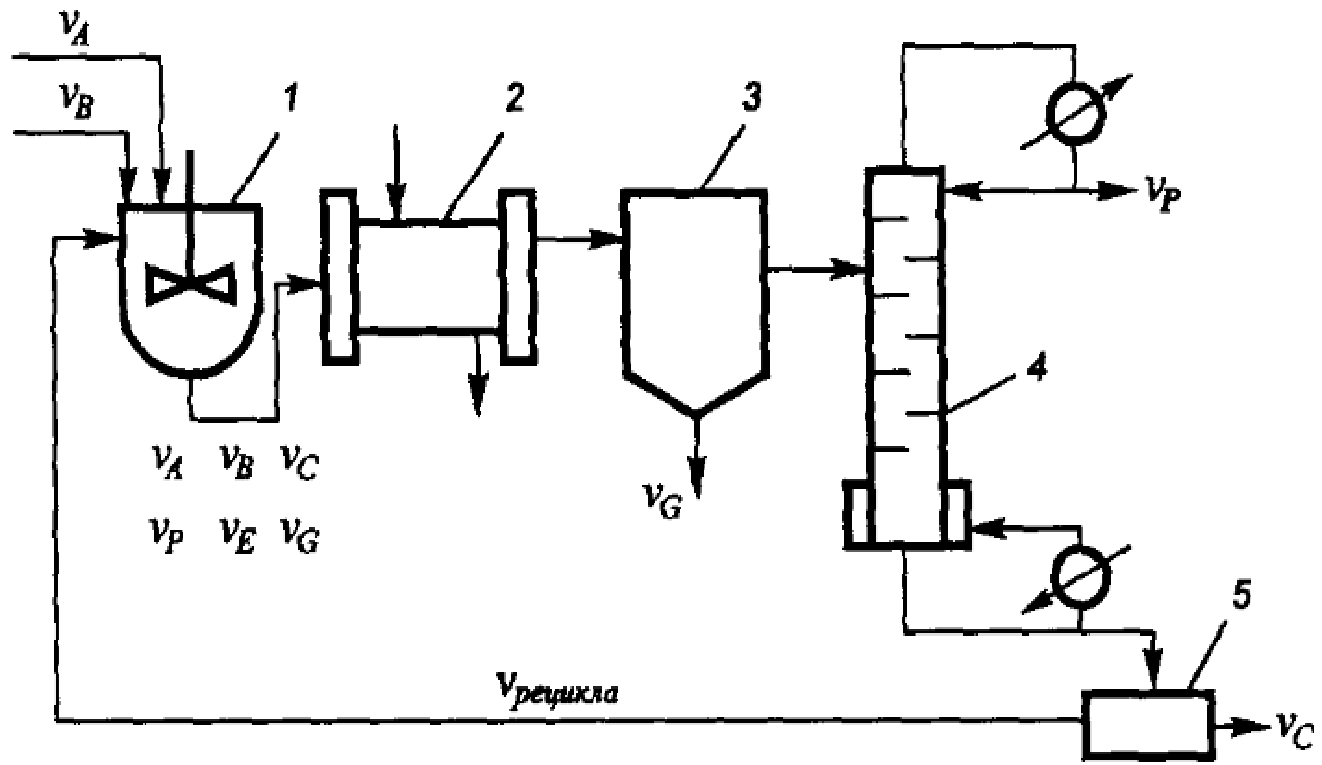


Рис. 1.2. Принципиальная технологическая схема получения целевого продукта P^*: *1* – реактор с мешалкой; *2* – теплообменник; *3* – отстойник; *4* – ректификационная колонна; *5* – делитель потока

В химической промышленности целесообразно выделить 5 ступеней иерархии системы.

1. Микроуровень – процессы и явления рассматриваются без учёта влияния закономерностей движения потоков фаз в аппаратах.
2. Макроуровень – ФХС – представляет собой секцию аппарата (например, слой насадки или тарелку) или отдельный аппарат. Все процессы рассматриваются с учётом движения материальных и тепловых потоков.
3. Уровень химического производства – ХТС – представляет собой совокупность аппаратов, связанных между собой материальными, тепловыми и информационными потоками.
4. Уровень предприятия – это несколько производств, составляющих предприятие, при анализе работы которого необходимо учитывать экономические и управленческие закономерности протекания бизнес-процессов функционирования предприятия.
5. Уровень компании или объединения – это несколько предприятий, объединённых в компанию (Газпром, Лукойл, Сибур и др.).

Следует отметить, что на каждом из перечисленных уровней иерархии совместно решаются задачи *оптимизации технологических процессов* и *автоматизации управления производством*.

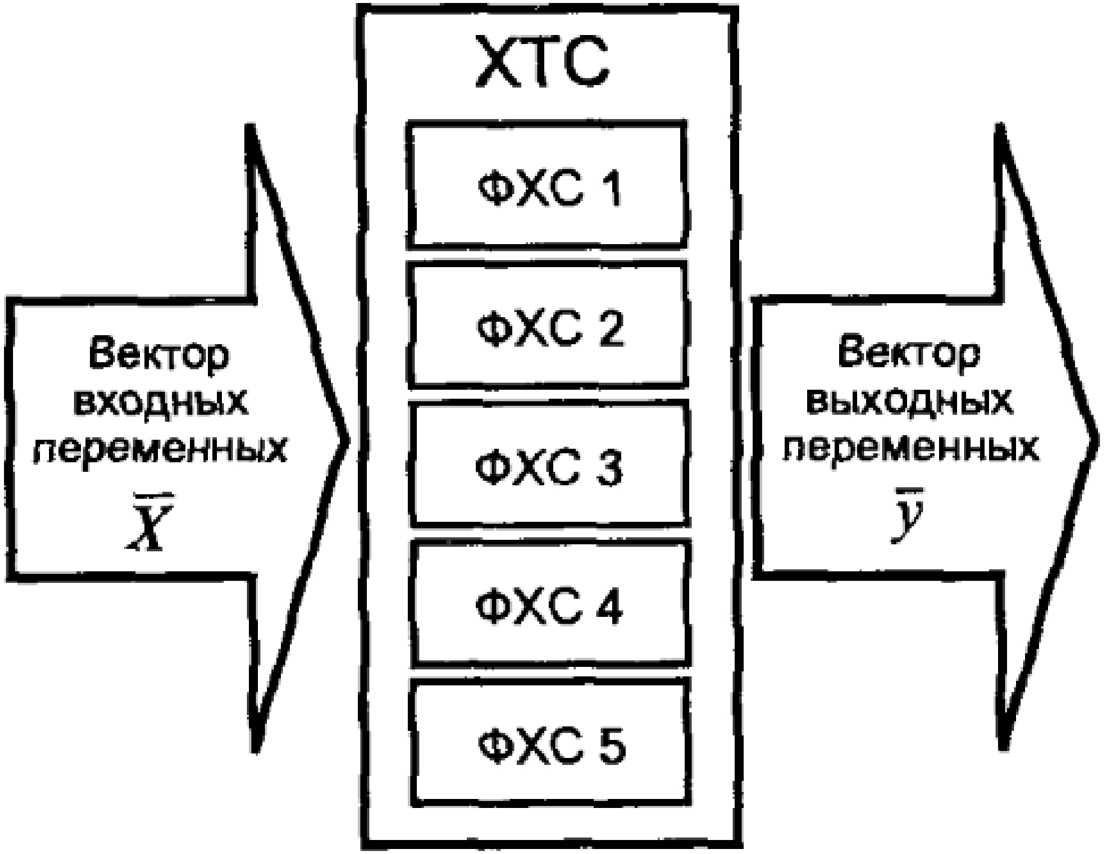


Рис. 1.3. Схематическое представление модели ХТС, технологическая схема которой представлена на рис. 1.2, в виде совокупности ФХС

Построение математического описания ХТП

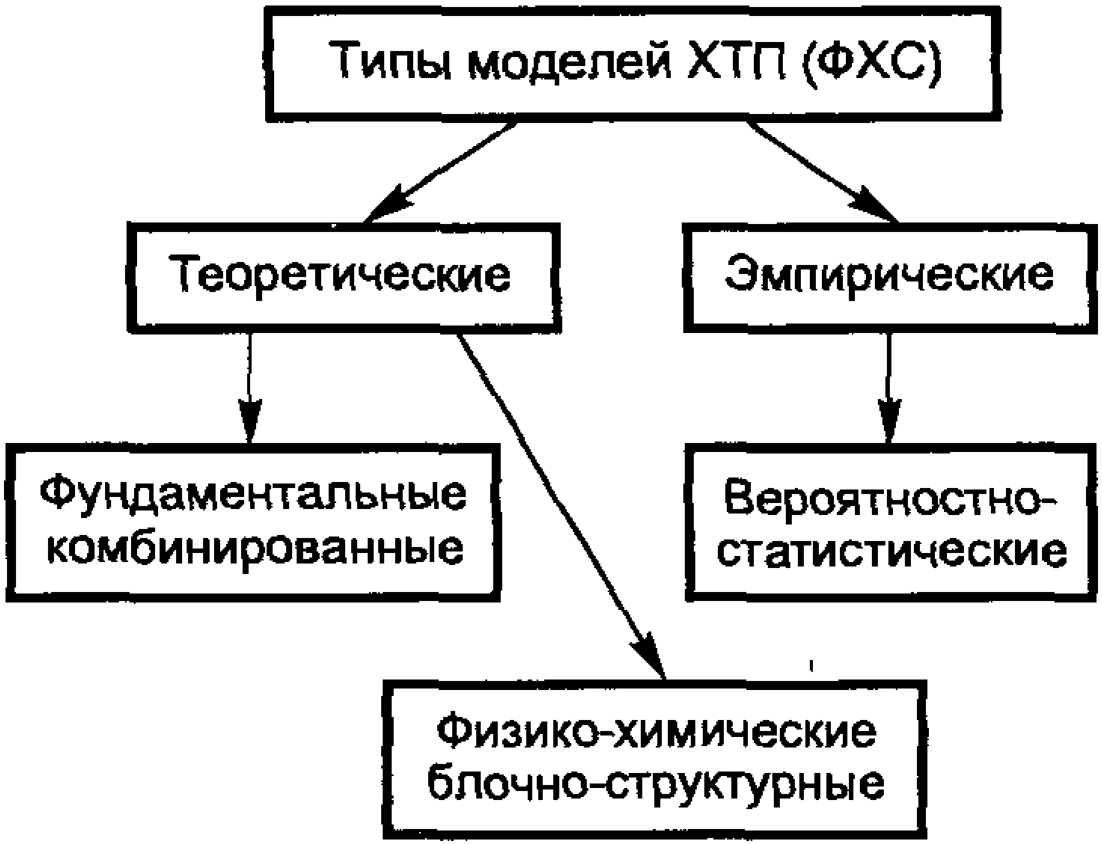


Рис. 1.4. Типы моделей ХТП (ФХС)

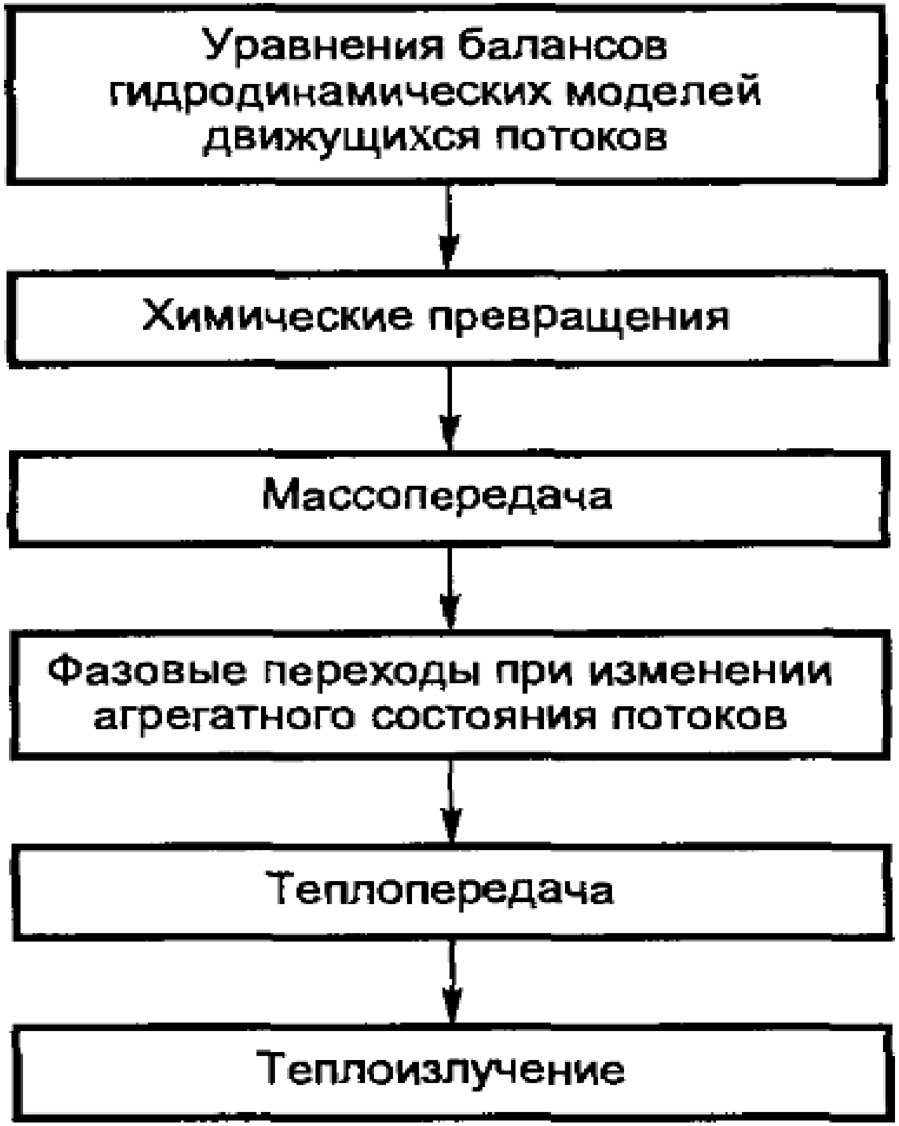


Рис. 1.5. Основные «элементарные» процессы при построении физико-химических блочно-структурных моделей ХТП

Для совокупности этих «элементарных» процессов получаются три основных типа уравнений математического описания.

1. *Системы конечных уравнений* (СКУ): *системы линейных алгебраических уравнений* (СЛАУ) или *системы нелинейных уравнений* (СНУ).
2. *Системы обыкновенных дифференциальных уравнений* (СОДУ).
3. *Системы дифференциальных уравнений в частных производных* (СДУЧП).

математическая модель – это система уравнений, которая связывает между собой входные и выходные переменные реального процесса (МО), для прогнозирования свойств которого необходимо с помощью специального алгоритма решить эту систему уравнений, а сам алгоритм должен быть реализован на компьютере.

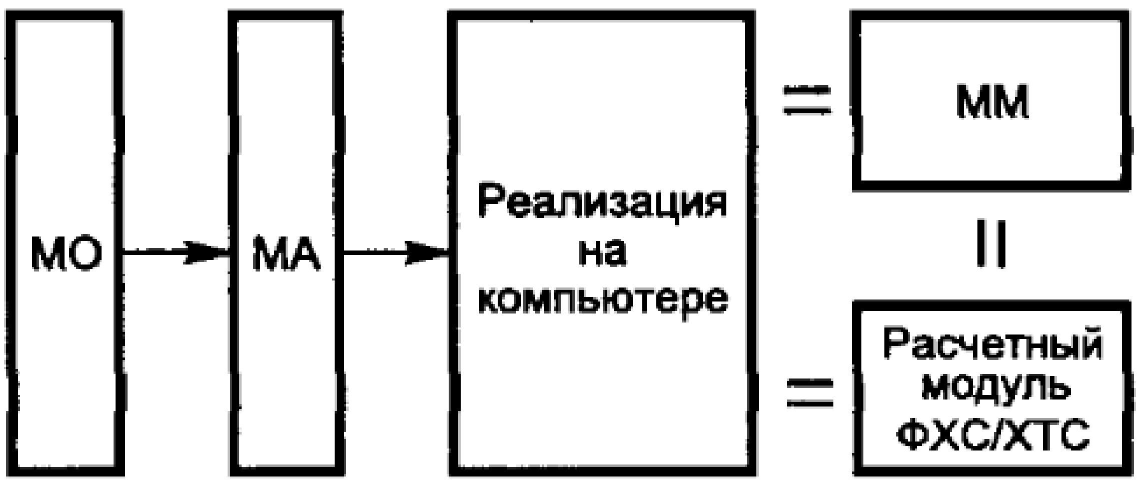


Рис. 1.6. Этапы построения математической модели ХТП

Идентификация математических моделей ХТП

Разработанную математическую модель процесса необходимо использовать для исследования и прогнозирования поведения реального объекта, т.е. её свойства и поведение с определённой степенью приближения должны совпадать с моделируемым процессом. Это свойство ММ называется свойством *традуктивности*, или *переносимости* результатов расчёта, получаемых с помощью ММ, на поведение реальных ХТП. В результате вместо анализа свойств реальных объектов или их физических моделей, реализуемых обычно на пилотных или полупромышленных установках, большинство исследований можно проводить с применением разработанной ММ, что существенно дешевле, быстрее и безопаснее.

Для корректного решения этих задач необходимо, чтобы математическая модель была *адекватна реальному процессу*.

Под адекватностью математической модели понимается соответствие её реальному объекту как *качественное* (тенденции изменения переменных в модели и в объекте должны быть одинаковы), так и *количественное* (экспериментальные данные должны совпадать с расчётными).

Адекватность ММ проверяется с помощью с выражения (1.4), включающего норму вектора рассогласования $\left\|\bar{y}^{\text{расч}} - \bar{y}^{\text{эксп}}\right\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(y_i^{\text{расч}} - y_i^{\text{эксп}}\right)^2}$:

$$\left\|\bar{y}^{\text{расч}} - \bar{y}^{\text{эксп}}\right\| \le \varepsilon, \qquad (1.4)$$

где $\bar{y}^{\text{ расч}}$ – значения выходных параметров, рассчитанные по ММ; $\bar{y}^{\text{эксп}}$ – значения выходных параметров, полученные экспериментально на реальном объекте при тех же значениях входных переменных $\bar{X}$ (1.3), что $\bar{y}^{\text{ расч}}$; ε – погрешность модели, которая должна быть близка к погрешности экспериментальных измерений.

Если адекватность ММ не достигнута, необходимо решать *задачу идентификации*, т.е. отождествления МО объекта моделирования с описанием закономерностей реально протекающих процессов.

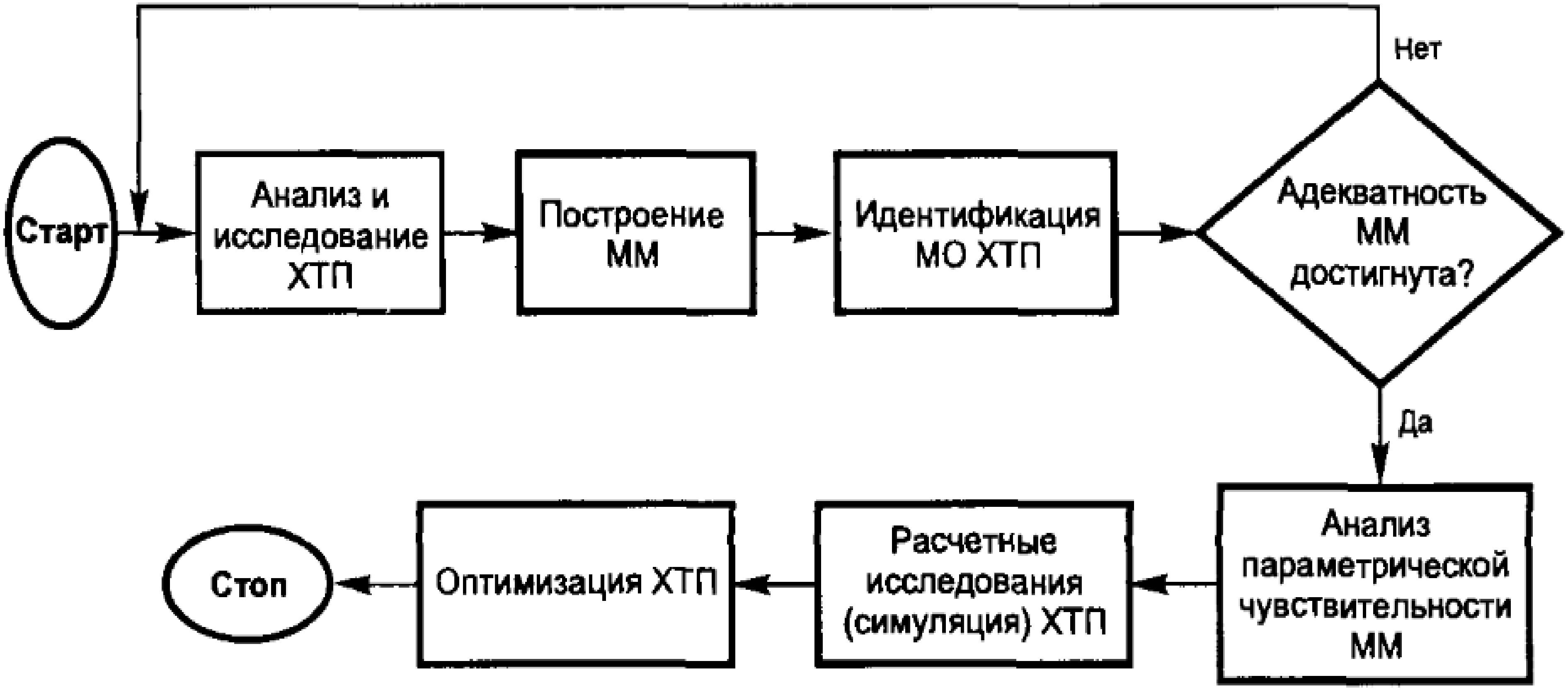
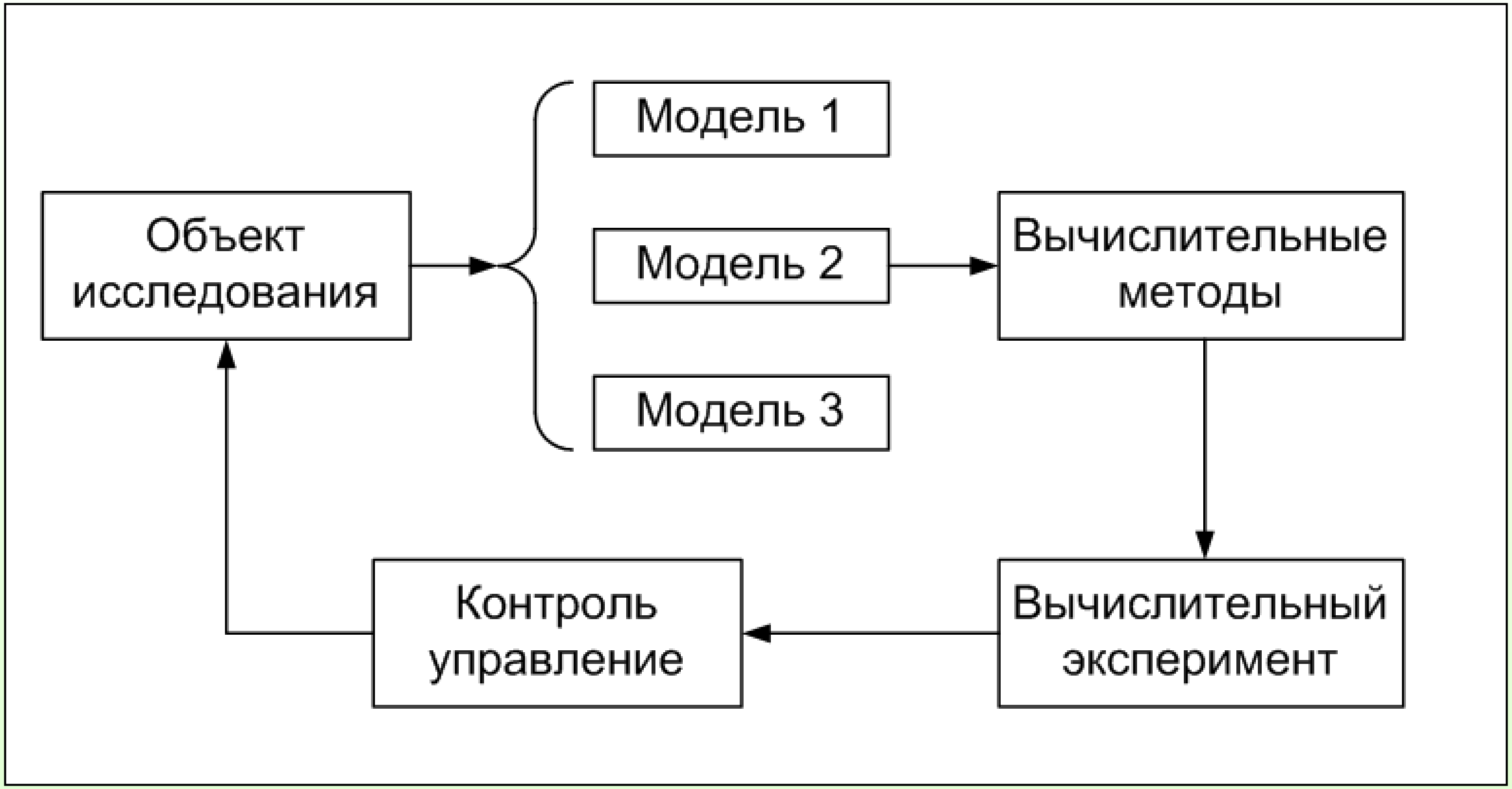


Рис. 1.10. Блок-схема процедуры компьютерного моделирования ХТП

Основные этапы математического моделирования:

- Разработка модели – ***формализация*** (прикладные и фундаментальные науки)
- Разработка метода (алгоритма) решения уравнения модели – ***алгоритмизация*** (Вычислительная математика)
- Создание программы – ***программирование*** **(**информатика, языки программирования)
- Расчеты, анализ результатов – ***практическое использование***

Место вычислительных методов в научных исследованиях



Предметом вычислительной математики являются численные методы (алгоритмы) решения математических задач, возникающих при исследовании реальных объектов методом математического моделирования

Вычислительная математика отличается от других математических дисциплин и обладает специфическими особенностями.

1. Вычислительная математика имеет дело не только с непрерывными, но и с дискретными объектами. Так, вместо отрезка прямой часто рассматривается система точек $\{t_k\}_{k=0}^{K}$, вместо непрерывной функции $f(x)$ — табличная функция $\{f_k\}_{k=0}^{K}$, вместо первой производной — ее разностная аппроксимация, например,

$$\frac{f_{k+1}-f_k}{x_{k+1}-x_k}, \quad k = 0 \div K, \quad x_{k+1} > x_k.$$

Такие замены, естественно, порождают погрешности метода.

2. В машинных вычислениях присутствуют числа с ограниченным количеством знаков после запятой из-за конечности длины мантиссы при представлении действительного числа в памяти ЭВМ. Другими словами, в вычислениях присутствует машинная погрешность (округления) δ_M. Это приводит к вычислительным эффектам, неизвестным, например, в классической теории обыкновенных дифференциальных уравнений, уравнений математической физики или в математическом анализе.

3. В вычислительной практике большое значение имеет *обусловленность задачи*, т. е. чувствительность ее решения к малым изменениям входных данных.

4. В отличие от «классической» математики выбор вычислительного алгоритма влияет на результаты вычислений.

5. Существенная черта численного метода — *экономичность* вычислительного алгоритма, т. е. минимизация числа элементарных операций при выполнении его на ЭВМ.

Использование того или иного метода вычислительной математики предполагает его тщательный анализ:

1. Все методы имеют ограничения по входным параметрам
2. Сами методы имеют существенные ограничения по применимости
3. Оценка качества решения (погрешность, скорость сходимости, устойчивость)
4. Стандартные программные продукты значительно ограничены количеством решаемых задач, среди которых в основном линейные задачи.

Вывод:

пользуясь различными программными продуктами (MathCad, Mathlab и т.д.) необходимо знать те численные методы, которые они реализуют, иначе результаты могут быть плачевными.

Требования к расчётным модулям, реализующим алгоритмы вычислений по различным численным методам:

- надёжность получения решения, т.е. обеспечение сходимости вычислений к решению задачи с требуемой точностью;
- физическая обоснованность получаемого решения;
- простота задания исходных данных для итерационных (меняющихся) в процессе расчёта переменных – желательна автоматизация этой процедуры;
- простые и эффективные способы изменения итерируемых переменных и параметров алгоритмов в случае отсутствия сходимости;
- экономия ресурсов компьютера – минимальные время расчётов и объём используемой оперативной памяти.

Виды численных методов:

- **Прямые** – решение получают за конечное число арифметических действий
- **Итерационные** – точное решение может быть получено **теоретически** в виде предела **бесконечной сходящейся** последовательности вычислений
- **Вероятностные** – методы случайного поиска решения (***угадывания***)

Все виды численных методов позволяют получить только **приближенное решение** задачи, то есть численное решение **всегда содержит погрешность**.

Литература

1. Т.Н.Гартман, Д.В. Клушин. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: Учебное пособие для вузов. - М.: ИКЦ «АКАДЕМКНИГА», 2006. - 415 с.
2. А. Н. Васильев. Matlab. Самоучитель. Практический подход. – СПб: Наука и Техника, 2012. –456 с.
3. В.М. Вержбицкий. Основы численных методов: Учебник для вузов. - М.: Высш. шк., 2009. - 840 с.
4. Кетков Ю.Л., Кетков А.Ю., Шульц М.М. MATLAB 7: программирование, численные методы. – СПб.: БХВ-Петербург, 2005. – 752 с.
5. В.Ф. Формалев, Д.Л. Ревизников. Численные методы. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2004. -400 с.
6. И.Б. Петров, А.И. Лобанов. Лекции по вычислительной математике: Учебное пособие. - М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2006. – 522 с.
7. К.Э.Плотников. Вычислительные методы. Теория и практика в среде MATLAB. - М.: «Горячая линия-Телеком», 2009. – 496 с.
8. Е.Р. Алексеев, О. В.Чеснокова. Решение задач вычислительной математики в пакетах Mathcad 12, MATLAB 7, Maple 9. - М.: НТ Пресс, 2006. – 496 с.
9. В. Г. Потемкин. Система инженерных и научных расчётов MATLAB. Справочное пособие. – В 2-х т. - М.: ДИАЛОГ-МИФИ, 1999. – 670 с.
10. Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. Численные методы. - М., 2002. - 632 с.