

*B.B. Кафаров  
B.P. Мешалкин*

# **Анализ и синтез химико- технологических систем**

*Допущено Государственным комитетом СССР  
по народному образованию в качестве учебника  
для студентов химико-технологических  
специальностей высших учебных заведений*



**МОСКВА  
«ХИМИЯ»  
1991**

ББК 35.11

К 305

УДК 677.021.12.001.2.57 (075.8)

Рецензенты:

д-р техн. наук, проф. *Л. А. Серафимов*,  
д-р техн. наук, проф. *Г. М. Островский*

**Кафаров В. В., Мешалкин В. П.**

**К 305** Анализ и синтез химико-технологических систем. Учебник для вузов.—М.: Химия, 1991.—432 с.: ил.

ISBN 5-7245-0366

Даны основы системного подхода к исследованию структуры и свойств функционирования производств химической и смежных отраслей промышленности, представляющих собой разного уровня сложности химико-технологические системы (ХТС). Изложены принципы математического моделирования, методы и алгоритмы анализа ХТС на основе использования различных классов топологических моделей (графов), математического аппарата разреженных матриц, классической теории множеств, теории нечетких множеств и методов нелинейного программирования. Приведены принципы синтеза ресурсосберегающих экологически безопасных ХТС на основе использования теории искусственного интеллекта. Изложена методика разработки специального программного обеспечения для решения задач анализа и синтеза ХТС в отраслевых системах автоматизированного проектирования и АСУ ТП.

Предназначается для студентов химико-технологических специальностей вузов.

Будет полезна для научных и инженерно-технических работников химической и смежных отраслей промышленности, которые занимаются инженерно-аппаратурным оформлением, расчетом и технологическим проектированием ресурсосберегающих экологически безопасных производств.

К 2802000000-078  
050(01)-91 78-91

ББК 35.11

ISBN 5-7245-0366

© В. В. Кафаров, В. П. Мешалкин,  
1991

# ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие . . . . .	7
Введение . . . . .	11
Основные сокращения . . . . .	14
<b>Часть I. Общие положения теории анализа и синтеза химико-технологических систем . . . . .</b>	<b>16</b>
<i>Глава 1. Основные понятия математического моделирования, анализа и синтеза химико-технологических систем . . . . .</i>	<i>16</i>
1.1. Общая характеристика ХТС как объекта исследования . . . . .	16
1.2. Виды типовых технологических операторов ХТС . . . . .	20
1.3. Классификация ХТС по особенностям технологической топологии	22
1.4. Классификация ХТС по способу функционирования . . . . .	30
1.5. Понятия малоотходных и ресурсосберегающих ХТС . . . . .	32
1.6. Виды критерии эффективности ХТС . . . . .	34
1.7. Основные свойства ХТС . . . . .	36
1.8. Классификация моделей и понятие идентификации ХТС . . . . .	42
1.9. Основные сведения о проектировании и эксплуатации ХТС . . . . .	45
1.10. Понятия анализа, оптимизации и синтеза ХТС . . . . .	47
1.11. Контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы . . . . .	48
<i>Глава 2. Принципы математического моделирования и анализа ХТС . . . . .</i>	<i>50</i>
2.1. Операторно-символическая математическая модель ХТС . . . . .	50
2.2. Прямые методы идентификации статических режимов ХТС . . . . .	55
2.3. Математическое моделирование – основной метод решения задач проектирования и эксплуатации ХТС . . . . .	59
2.4. Постановка и принципы решения задач анализа ХТС . . . . .	62
2.5. Характеристика блочного принципа анализа ХТС . . . . .	66
2.6. Общий вид систем уравнений материально- тепловых балансов ХТС . . . . .	71
2.7. Подготовка исходных данных для составления систем уравнений материально- тепловых балансов . . . . .	82
2.8. Признаки существования решения систем уравнений материально- тепловых балансов . . . . .	87
2.9. Определение степени свободы ХТС . . . . .	98
2.10. Рекомендации по выбору регламентированных и оптимизирующих информационных переменных ХТС . . . . .	104
2.11. Контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы . . . . .	108
<i>Глава 3. Операции переработки информации при математическом моделировании и анализе ХТС . . . . .</i>	<i>110</i>
3.1. Логико-информационные схемы ХТС – модели переработки информации . . . . .	110
3.2. Стратегия решения информационно-разреженных систем уравнений математических моделей ХТС . . . . .	115
3.3. Классификация модулей расчета технологических операторов ХТС . . . . .	120
3.4. Понятия коэффициентов разделения и коэффициентов полезного действия технологических операторов ХТС . . . . .	128

3.5. Матрицы преобразования технологических операторов ХТС . . . . .	136
3.6. Основные этапы математического моделирования и анализа действующих ХТС . . . . .	145
3.7. Контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы . . . . .	151
<b>Глава 4. Приципы построения топологических моделей ХТС . . . . .</b>	<b>153</b>
4.1. Классификация и назначение топологических моделей ХТС . . . . .	153
4.2. Основы теории графов . . . . .	155
4.3. Матричное представление графов . . . . .	165
4.4. Потоковые графы ХТС . . . . .	171
4.4.1. Параметрические потоковые графы . . . . .	171
4.4.2. Материальные потоковые графы . . . . .	172
4.4.3. Тепловые потоковые графы . . . . .	173
4.4.4. Эксергетические потоковые графы . . . . .	173
4.4.5. Циклические потоковые графы . . . . .	179
4.5. Информационно-потоковые графы ХТС . . . . .	181
4.5.1. Двудольные информационные графы . . . . .	181
4.5.2. Информационные графы . . . . .	183
4.6. Сигнальные графы ХТС . . . . .	186
4.7. Структурные графы ХТС . . . . .	196
4.8. Контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы . . . . .	202
<b>Часть II. Методы и алгоритмы анализа и оптимизации химико-технологических систем . . . . .</b>	<b>205</b>
<b>Глава 5. Топологическо-структурные методы и алгоритмы анализа ХТС</b>	<b>205</b>
5.1. Топологический метод составления систем уравнений материально- тепловых балансов ХТС . . . . .	205
5.2. Методы решения сигнальных графов ХТС . . . . .	219
5.2.1. Эквивалентные преобразования сигнальных графов . . . . .	219
5.2.2. Метод решения сигнальных графов с применением универсальной топологической формулы . . . . .	225
5.2.3. Формализованный метод решения сигнальных графов . . . . .	229
5.3. Топологический метод анализа чувствительности ХТС на основе сигнальных графов . . . . .	234
5.3.1. Характеристики чувствительности ХТС . . . . .	234
5.3.2. Топологический метод расчета логарифмической чувствительности ХТС по сигнальному графу . . . . .	238
5.4. Матричный метод анализа ХТС . . . . .	240
5.5. Контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы . . . . .	245
<b>Глава 6. Топологические алгоритмы оптимизации стратегии анализа сложных ХТС . . . . .</b>	<b>246</b>
6.1. Алгоритмы оптимизации стратегии анализа сложных ХТС на основе параметрических потоковых графов . . . . .	246
6.1.1. Общая характеристика алгоритмов и критерии оптимизации стратегии анализа ХТС . . . . .	246
6.1.2. Алгоритмы идентификации простых контурных подсистем в сложных ХТС . . . . .	258
6.1.3. Алгоритмы оптимизации стратегии анализа сложных много- контурных ХТС . . . . .	262
6.1.4. Алгоритм декомпозиции сложных встречечно-направленных ХТС . . . . .	269

6.2. Алгоритмы оптимизации стратегии решения систем уравнений ХТС с применением информационно-потоковых графов . . . . .	270
6.2.1. Алгоритм оптимизации стратегии решения совместно разомкнутых систем уравнений . . . . .	270
6.2.2. Алгоритм оптимизации стратегии решения совместно замкнутых систем уравнений . . . . .	276
6.3. Контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы . . . . .	279
 <i>Глава 7. Декомпозиционно-топологические методы анализа и оптимизации сложных ХТС . . . . .</i>	280
7.1. Общая характеристика численных методов анализа ХТС . . . . .	280
7.2. Численные методы и алгоритмы решения систем нелинейных уравнений . . . . .	283
7.2.1. Метод простой итерации и его модификации . . . . .	283
7.2.2. Метод Ньютона . . . . .	284
7.2.3. Квазиньютоновские методы . . . . .	286
7.2.4. Методы минимизации . . . . .	288
7.2.5. Метод дифференцирования по параметру . . . . .	288
7.3. Методы решения систем линейных уравнений . . . . .	289
7.3.1. Общая характеристика численных методов решения систем линейных алгебраических уравнений . . . . .	289
7.3.2. Прямые итерационные методы . . . . .	291
7.4. Методы решения информационно-разреженных систем линейных уравнений . . . . .	293
7.4.1. Диакоптический метод . . . . .	293
7.4.2. Методы упорядочения информационно-разреженных систем уравнений . . . . .	295
7.4.3. Метод прогонки . . . . .	298
7.5. Эффективность различных численных методов решения систем алгебраических уравнений ХТС . . . . .	300
7.6. Математическая постановка задачи и классификация методов оптимизации ХТС . . . . .	302
7.7. Двухуровневые методы оптимизации сложных ХТС . . . . .	306
7.7.1. Общая стратегия двухуровневых методов . . . . .	306
7.7.2. Метод закрепления промежуточных переменных . . . . .	309
7.7.3. Метод цен . . . . .	310
7.8. Общая характеристика специальных программ цифрового моделирования ХТС . . . . .	313
7.9. Контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы . . . . .	317
 <b>Часть III. Основы теории синтеза оптимальных ХТС . . . . .</b>	319
 <i>Глава 8. Принципы синтеза оптимальных ХТС . . . . .</i>	319
8.1. Классификация исходных задач синтеза ХТС . . . . .	319
8.2. Краткая характеристика способов и приемов ресурсосбережения в ХТС . . . . .	323
8.3. Классификация и общая характеристика принципов синтеза ХТС . . . . .	330
8.4. Декомпозиционно-поисковый принцип синтеза ХТС . . . . .	339
8.4.1. Основные предпосылки и общая методология . . . . .	339
8.4.2. Стратегия декомпозиции постановки исходных задач синтеза . . . . .	342
8.4.3. Редуктивно-граничная декомпозиция множества решений исходных задач синтеза . . . . .	352
8.4.4. Стратегия перспективно-отсекающей декомпозиции множества решений ИЗС . . . . .	354
8.5. Эвристическо-декомпозиционный принцип синтеза ХТС . . . . .	357

8.5.1. Основные предпосылки и общая методология . . . . .	357
8.5.2. Процедура поиска семантических решений . . . . .	359
8.5.3. Самообучающаяся процедура оптимального выбора эвристик . . . . .	361
8.6. Интегрально-гипотетический принцип синтеза ХТС . . . . .	365
8.7. Эволюционный принцип синтеза ХТС . . . . .	369
8.8. Операции упорядоченного поиска решений исходных задач синтеза ХТС . . . . .	372
8.9. Контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы . . . . .	385
<b>Глава 9. Декомпозиционно-эвристические методы синтеза ресурсосберегающих ХТС . . . . .</b>	<b>387</b>
9.1. Многостадийный эвристическо-эволюционный метод синтеза ресурсосберегающих ХТС . . . . .	387
9.2. Постановка исходных задач синтеза ресурсосберегающих теплообменных систем . . . . .	395
9.3. Декомпозиционные методы синтеза ресурсосберегающих теплообменных систем . . . . .	398
9.4. Постановка исходных задач синтеза ресурсосберегающих систем ректификации многокомпонентных смесей . . . . .	411
9.5. Декомпозиционные методы синтеза оптимальных ациклических систем ректификации . . . . .	417
9.6. Метод синтеза ресурсосберегающих систем ректификации со связанными тепловыми потоками . . . . .	423
9.7. Контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы . . . . .	429
<b>Библиографический список . . . . .</b>	<b>430</b>

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Производства, или технологические установки, химической, нефтеперерабатывающей, газоперерабатывающей, нефтехимической и биохимической промышленности как объекты научно-инженерной деятельности представляют собой различного уровня сложности *химико-технологические системы* (ХТС), потребляющие для выпуска разнообразных продуктов и полупродуктов огромные количества всех видов сырья, топливно-энергетических ресурсов (ТЭР) и конструкционных материалов, а также воды и воздуха. Расчет и оптимизация технологических режимов отдельных химико-технологических процессов (ХТП) и аппаратов без учета их взаимосвязей с остальными ХТП и аппаратами данного производства могут привести к неоптимальным значениям параметров технологических режимов и показателей эффективности функционирования всей технологической установки, т. е. ХТС в целом.

Успешное решение важнейших задач ускорения научно-технического прогресса в химической и указанных смежных отраслях промышленности – задач интенсификации и реконструкции действующих производств, а также задач проектирования и ввода в эксплуатацию в кратчайшие сроки ресурсосберегающих экологически безопасных и высоконадежных производств – стало возможным в результате широкого применения ЭВМ и бурного развития с конца 1960 и начала 1970 г.г. нового научного направления в области теоретических основ химической технологии и кибернетики химико-технологических процессов – *системотехники химических производств*, которое в англоязычной научно-технической литературе называется «Process Systems Engineering» (в ряде случаев употребляется также название «Process Engineering»; в немецкоязычной технической литературе – «Systemverfahrenstechnik»).

*Предметом изучения системотехники химических производств являются химико-технологические системы* (английские названия – синонимы: «Chemical Process», «Process System», «Process», «Chemical Processing Systems», «Processing System»; по-немецки «Verfahrenstechnische Systeme»).

Необходимо подчеркнуть, что системотехника химических производств использует результаты научных исследований по типовым процессам химической технологии и оборудованию химических производств (английские понятия: «unit operation», «unit equipment»), которые являются предметом изучения научного направления – *процессы и аппараты химической технологии* (английское понятие: «Chemical Engineering»; немецкое: «Verfahrenstechnik»).

Системотехника химических производств – молодая бурно развивающаяся область науки. Первый международный журнал по системотехнике химических производств «Process Engineering Magazine (PEM)» начал издаваться в 1981 г. в Англии.

Первый Международный конгресс по системотехнике химических производств состоялся в 1982 г. в Японии (г. Токио); второй – в 1985 г. в Англии (г. Лондон); третий – в 1988 г. в Австралии (г. Сидней); четвертый – в 1991 г. в Канаде (г. Монтеррэй).

Первая Всесоюзная научная конференция «Математическое моделирование сложных ХТС («СХТС-І»)» состоялась в 1975 г. (г. Ереван), а Всесоюзная научная конференция «СХТС-V» – в 1988 г. (г. Казань).

В книге обобщены: методы и алгоритмы анализа ХТС на основе использования системного подхода в химической технологии и различных классов топологических моделей (графов); декомпозиционные методы решения многомерных систем уравнений математических моделей ХТС с учетом разреженности (неплотности) их информационной структуры, а также двухуровневые методы оптимизации ХТС.

Впервые подробно изложена методология поиска оптимальных решений задач синтеза ресурсосберегающих ХТС, представляющих собой *интеллектуальные творческие, или неформализуемые*, задачи; излагаются методы и алгоритмы автоматизированного синтеза (по-английски: «Computer Aided Synthesis»; по-немецки: «Automatisierte Synthese») ресурсосберегающих ХТС на основе теории искусственного интеллекта.

Особое внимание в книге уделено описанию принципов создания специального программного обеспечения для автоматизированного анализа и синтеза ХТС, которое позволяет инженеру химику-технологу в интеллектуальном диалоге с ЭВМ практически решать разнообразные задачи проектирования и эксплуатации производств с целью повышения их экономической эффективности, надежности и экологической безопасности.

Основные теоретические вопросы поясняются практическими примерами расчета и оптимизации ХТС крупнотоннажных производств ряда неорганических и органических веществ. Показано применение методов и алгоритмов синтеза ресурсосберегающих ХТС для автоматизированного проектирования (по английски: «Computer – Aided Design»; по-немецки: «Automatisierte Projektierung – Automatisierter Entwurf») технологических схем хлорорганических производств и установок первичной нефтепереработки с оптимальными удельными расходами сырья, ТЭР и конструкционных материалов.

Излагаемый в книге теоретический материал поясняется решениями многочисленных задач, каждая глава завершается контрольными вопросами и заданиями для самостоятельной работы,

которые должны обеспечить приобретение читателем основных практических навыков.

При написании книги в довольно компактной форме отражены основные результаты оригинальных научных исследований авторов по принципам разработки топологических моделей (графов) ХТС, по топологическим методам и алгоритмам оптимальной стратегии анализа ХТС, по декомпозиционным принципам автоматизированного синтеза оптимальных ХТС на основе теории искусственного интеллекта, по диалоговым эвристическим-эволюционным методам синтеза ресурсосберегающих ХТС, которые получили международное признание.

В книге кратко обобщены материалы многолетних научных исследований по системотехнике химических производств, выполненных крупными зарубежными и советскими учеными (J. M. Douglas, S. Bretschnaider, G. Gruhn, E. J. Henley, D. M. Himmelblau, V. Hlaváček, W. R. Johns, C. J. King, R. W. H. Sargent, Geo Stephanopoulos, Чэнь Б., D. W. T. Rippin, D. A. Rudd, A. W. Westerberg, V. Vaclavek, М. Ф. Нагиев, Г. М. Островский, В. Л. Перов, Ф. Б. Петлюк, Л. С. Попырин, Л. А. Серафимов).

Настоящая книга представляет собой учебник по одной из базовых дисциплин «Анализ и синтез ХТС», которая изучается студентами химико-технологических вузов по специальности 25.12 «Основные процессы химических производств и химическая кибернетика». Методика изложения материала и использованные приемы обучения основаны на многолетнем опыте авторов по чтению лекций, проведению семинаров и лабораторных занятий на кафедре кибернетики химико-технологических процессов Московского ордена Ленина и ордена Трудового Красного Знамени химико-технологического института им. Д. И. Менделеева.

Для изучения дисциплины «Анализ и синтез ХТС» студенты должны владеть основными знаниями по общебазовательным дисциплинам: высшая математика, вычислительная математика и программирование, применение ЭВМ в химической технологии; по инженерно-технологическим дисциплинам: процессы и аппараты химической технологии, общая химическая технология и основы промышленной экологии; автоматизация ХТП; по специальным дисциплинам: методы кибернетики ХТП, математическое моделирование и оптимизация ХТП – в объеме, предусмотреннном типовыми программами химико-технологических вузов.

В предлагаемом учебнике излагаются сведения по теории математического моделирования анализа и синтеза ХТС, которые имеют важнейшее значение при подготовке высококвалифицированных инженеров химиков-технологов широкого профиля, способных творчески решать актуальные задачи ускорения научно-технического прогресса в различных отраслях химико-лесного комплекса.

Книга рекомендуется для использования в качестве учебника

студентам всех химико-технологических специальностей как при углубленном самостоятельном изучении теоретических основ технологического проектирования химических производств, общей химической технологии и основ промышленной экологии, так и при выполнении курсовых и дипломных проектов. Учебник может быть использован студентами специальностей: «Машины и аппараты химических производств» и «Автоматизация производственных процессов» при изучении дисциплины «Математическое моделирование производственных процессов».

Учебник может служить методическим руководством для преподавателей и аспирантов химико-технологических вузов и химических факультетов университетов, а также для слушателей Институтов повышения квалификации руководящих работников и специалистов химических отраслей промышленности.

Авторы убеждены, что наряду с этим книга может быть полезна инженерно-техническим и научным работникам научно-исследовательских институтов, проектно-конструкторских и пуско-наладочных организаций химической и смежных с ней отраслей промышленности, занимающихся инженерно-аппаратурным оформлением, расчетом и проектированием технологических схем ресурсосберегающих производств, а также разработкой специального программного обеспечения систем автоматизированного проектирования (САПР) и АСУ ТП.

Доступность изложения теоретического материала, сравнительная простота используемого математического аппарата, наглядность приводимых примеров и подробное описание процедур решения разнообразных задач анализа и синтеза ХТС дают возможность заинтересованному читателю не только активно овладеть основными понятиями, принципами и методами системотехники химических производств, но также приобрести навыки их практического применения.

Авторы выражают благодарность научным сотрудникам, инженерам и аспирантам научно-исследовательской группы «Анализ и синтез ХТС» кафедры кибернетики химико-технологических процессов МХТИ им. Д. И. Менделеева, оказавшим неоценимую помощь в подготовке рукописи книги к изданию.

Все пожелания и критические замечания, которые могут способствовать улучшению содержания учебника, будут с признательностью приняты авторами.

# ВВЕДЕНИЕ

*✓*

*Химико-технологическая система (ХТС) – это целенаправленная совокупность процессов, аппаратов и машин химической технологии, которая обеспечивает проведение требуемых технологических операций химической и физической переработки сырья в продукты потребления и в промежуточные продукты. Различного уровня сложности ХТС соответствуют либо технологическим блокам и технологическим узлам, входящим в состав технологических установок, либо производствам, т. е. технологическим установкам в целом химической, нефтеперерабатывающей, газоперерабатывающей, нефтехимической и биохимической промышленности. Познавательная и практическая деятельность инженеров химиков-технологов при решении задач эксплуатации, интенсификации и реконструкции действующих производств, а также задач проектирования новых высокоеффективных производств связана с выполнением операций анализа, синтеза и оптимизации. Вначале кратко рассмотрим сущность познавательных операций анализа и синтеза.*

*Анализ как познавательная операция – это мысленное, а также часто и реальное расчленение (разложение, или декомпозиция) некоторого объекта (предмета, явления или процесса), свойства предметов или отношений (взаимосвязей) между предметами на некоторые части (элементы), признаки, характеристики, факторы.*

*Синтез как познавательная операция – это мысленное объединение в единое целое различных частей (элементов), свойств или сторон некоторых объектов; воссоединение целого из частей; иногда под синтезом понимают процесс рассуждения или последовательного получения некоторого нового утверждения, которое должно быть доказано на основе ранее уже доказанных утверждений или аксиом.*

*Оптимизация – это целенаправленная деятельность, обеспечивающая получение наилучших в определенном смысле результатов при соответствующих условиях и ограничениях.*

Кратко рассмотрим сущность практических инженерно-технологических операций анализа и синтеза ХТС. *Анализ ХТС как инженерно-техническая операция – это исследование структуры ХТС, расчет характеристик и показателей качества функционирования ХТС, определение влияния параметров ХТС на ее характеристики.*

*Синтез ХТС как инженерно-техническая операция – это создание принципов и способа функционирования ХТС; разработка структуры ХТС, определение параметров и характеристик, входящих в систему ХТП, которые обеспечивают требуемые цели функционирования ХТС.*

Решение задач анализа и оптимизации ХТС, а также задач синтеза ресурсосберегающих ХТС возможно лишь при наличии математических моделей ХТС, которые в формализованном виде отображают не только физико-химическую сущность входящих в систему ХТП, но и особенности технологических взаимосвязей между отдельными ХТП, имеющими каждый в отдельности разные, а иногда и противоречивые цели функционирования.

*Математическое моделирование* ХТС – это метод изучения свойств некоторых реальных ХТС путем проведения вычислительных экспериментов с математическими моделями этих ХТС на ЭВМ с использованием различных вычислительно-логических алгоритмов.

*Теория анализа и синтеза* ХТС представляет собой научную базу для решения важнейших задач ускорения научно-технического прогресса в химических отраслях промышленности: реконструкции действующих производств для повышения их эффективности; оптимизации технологических режимов производств с целью экономии сырья и ТЭР на предприятиях; проектирования ресурсосберегающих и экологически безопасных производств.

Наряду с этим методы анализа и синтеза ХТС как важнейшие компоненты методического и специального математического обеспечения отраслевых САПР и АСУ ТП позволяют получать оптимальные проектные решения в краткие сроки и интенсифицировать технологические режимы действующих производств. В связи с этим развитие теории анализа и синтеза ХТС способствует широкому применению ЭВМ в научных исследованиях, в проектировании и промышленности.

Методологией системотехники химических производств является системный подход в химической технологии.

*Системный подход в химической технологии* – это методологическое направление, основная цель которого состоит в разработке общей стратегии, а также неформализованных, или эвристических, и формализованных, методов комплексного исследования и создания сложных ХТП и ХТС разных типов и классов. Системный подход предполагает, что взаимосвязь и взаимодействие ХТП, входящих в некоторую ХТС, обеспечивают появление у этой ХТС принципиально новых свойств, которые не присущи ее отдельным невзаимосвязанным ХТП. Системный подход основан на одном из важнейших законов диалектического материализма – законе всеобщей взаимосвязи, взаимодействия и взаимообусловленности явлений и объектов в мире и обществе. Исходя из этого закона, любые изучаемые явления и объекты рассматриваются не только как самостоятельные системы, но и как подсистемы некоторой большей системы.

В последние годы сформировались следующие основные разделы системотехники химических производств: теория идентификации ХТС; теория анализа ХТС; теория оптимиза-

ции ХТС; теория синтеза ХТС; теория надежности и экологической безопасности ХТС.

Целью преподавания дисциплины «Анализ и синтез ХТС» является обучение студентов принципам разработки математических моделей ХТС, методам и алгоритмам анализа технологических режимов функционирования сложных ХТС для разработки научно обоснованных технологических и инженерно-технических мероприятий по повышению эффективности химических производств; в обучении студентов принципам, методам и алгоритмам синтеза ресурсосберегающих ХТС, которые позволяют проектировать технологические схемы высоконадежных и экологически безопасных производств с оптимальными удельными расходами сырья, топлива, энергии и конструкционных материалов.

Основные задачи изучения дисциплины «Анализ и синтез ХТС» состоят в усвоении студентами:

методологии системного подхода к исследованию ХТС; методов и алгоритмов анализа режимов функционирования сложных ХТС с целью выявления и устранения источников потерь сырья, топлива и энергии в системе;

принципов создания математических моделей (в том числе матричных и топологических, или графов) сложных ХТС;

методов и алгоритмов составления и расчета систем уравнений материально- тепловых и эксергетических балансов ХТС;

методов и алгоритмов расчета параметров технологических режимов и показателей эффективности функционирования ХТС (технико-экономических и технологических показателей, характеристик надежности, устойчивости и чувствительности) с применением различных классов топологических моделей (графов);

декомпозиционных методов оптимизации сложных ХТС;

принципов, методов и алгоритмов автоматизированного синтеза ХТС с оптимальными удельными расходами сырья, ТЭР и конструкционных материалов.

Основные умения и навыки, приобретаемые студентами в результате изучения дисциплины:

составлять и решать с помощью ЭВМ системы уравнений материально- тепловых и эксергетических балансов для выявления и устранения источников потерь сырья и ТЭР;

разрабатывать математические модели химических производств для исследования эффективности их функционирования;

разрабатывать и применять топологические модели для создания алгоритмов оптимальной стратегии расчета параметров технологических режимов сложных производств;

создавать и использовать декомпозиционно-эвристические алгоритмы синтеза ХТС в режиме диалога с ЭВМ для разработки технологических схем экологически безопасных производств с оптимальными удельными расходами сырья, ТЭР и конструкционных материалов.

# ОСНОВНЫЕ СОКРАЩЕНИЯ

- АСР – ациклическая система ректификации  
ВГ – верхняя граница  
ВЗУ – внешнее запоминающее устройство  
ГЗС – граничная задача синтеза  
ГОТС – гипотетическая обобщенная технологическая структура  
ДВР – дерево вариантов решений  
ДИГ – двудольный информационный граф  
ДСС – декомпозиция сложных систем  
ДП-принцип – декомпозиционный принцип  
ДПД (ДЭД) – дерево произвольной (элементарной) декомпозиции  
ДТГ – двудольный тепловой граф  
ДФЭ – дробный факторный эксперимент  
ИГ – информационный граф  
ИГ-принцип – интегрально-гипотетический принцип  
ИЗС – исходная задача синтеза  
ИИ – искусственный интеллект  
ИНЭ – исходные ненулевые элементы  
ИО – информационный оператор  
ИП – информационная переменная  
ИПГ – информационно-потоковый граф  
ИПТ – информационный поток  
ИС – интеллектуальная система  
ИФК – идеальный физический компонент  
крвп (кртп) – коэффициент разделения входного (технологического) потока  
ксрп – коэффициент структурного разделения потоков  
КЭ – критерий эффективности  
ЛИНС – логико-информационная схема  
ЛПР – лицо, принимающее решение  
МБ – материальный баланс  
МБС – матричная блок-схема  
МКС – многокомпонентная смесь  
ММ – математическая модель  
МПГК (МПГЭ) – материальный потоковый граф по массовому расходу химического компонента (элемента)  
МПГО – материальный потоковый граф по общему массовому расходу веществ  
МР – массовый расход  
МРП (МРС) – модуль расчета параметров (состояний)  
МТБ – материально-тепловой баланс  
НГ – нижняя граница  
НЗС – нереализуемая задача синтеза  
ННСГ (НСГ) – ненормализованный (нормализованный) сигнальный граф  
ННЭ – новые ненулевые элементы  
ОДУ – обыкновенные дифференциальные уравнения  
ОЕЯ – ограниченный естественный язык  
ОЗУ – оперативное запоминающее устройство  
OMP – общий массовый расход  
ОСА – оптимизация стратегии анализа  
ПГ – потоковый граф  
ПЗ – приведенные затраты  
ПЗС – произвольная задача синтеза  
ПО – предметная область  
ПОЯ – предметно-ориентированный язык

ППГ -- параметрический потоковый граф  
ППП -- пакет прикладных программ  
ПФЭ -- полный факторный эксперимент  
РК -- ректификационная колонна  
РС -- реакторная система  
РХП -- ресурсосберегающее химическое производство  
САПР -- система автоматизированного проектирования  
СБКФ -- стандартная блочно-компактная форма  
СБС -- скалярная блок-схема  
СВИП -- свободная информационная переменная  
СГ -- сигнальный граф  
СЛАУ -- система линейных алгебраических уравнений  
СЛУ -- система линейных уравнений  
СМГ -- семантический граф  
СНАУ -- система нелинейных алгебраических уравнений  
СНУ -- система нелинейных уравнений  
СПЦМ -- специальная программа цифрового моделирования  
СР -- система ректификации  
СРТП -- система ректификации со взаимосвязанными тепловыми потоками  
СТГ -- структурный граф  
СУ -- система уравнений  
СУМТБ -- система уравнений материально-теплового баланса  
ТА -- теплообменный аппарат  
ТЗ -- техническое задание  
ТО -- технологический оператор  
ТОР (ТОХП) -- технологический оператор разделения (химического вращения)  
ТП -- технологический поток  
ТПГ -- тепловой потоковый граф  
ТС -- теплообменная система  
ТЭР -- топливно-энергетические ресурсы  
УСВ -- упорядочение слоев вершин  
УТФ -- универсальная топологическая формула  
УФХС -- уравнение физико-химических связей  
ФЯ -- формализованный язык  
ХП -- химическое производство  
ХТП -- химико-технологический процесс  
ХТС -- химико-технологическая система  
ХЭТС -- химико-энерготехнологическая система  
ЦПГ -- циклический потоковый граф  
ЭВ-принцип -- эволюционный принцип  
ЭД-принцип -- эвристическо-декомпозиционный принцип  
ЭЗС -- элементарная задача синтеза  
ЭП -- эвристическое правило

# ОБЩИЕ ПОЛОЖЕНИЯ ТЕОРИИ АНАЛИЗА И СИНТЕЗА ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

## Глава 1

### ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ, АНАЛИЗА И СИНТЕЗА ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

#### 1.1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ХТС КАК ОБЪЕКТА ИССЛЕДОВАНИЯ

Любая ХТС как объект исследования имеет определенную технологическую структуру и заданные параметры, а взаимодействие ХТС с окружающей средой и результаты ее функционирования можно охарактеризовать входными и выходными переменными, представляющими собой некоторые информационные сигналы (рис. 1.1). *Технологическая структура*, или *технологическая топология* ХТС – это строение и внутренняя форма организации системы, отражающая состав элементов и особенности взаимосвязей между ними. Технологическую структуру (технологическую топологию) ХТС ( $G$ ) формально можно охарактеризовать числом элементов определенного конструкционного типа  $N_s$ , в которых протекают химико-технологические процессы (ХТП)  $g_s$ , известным законом взаимосвязей между отдельными элементами  $R$  и числом технологических потоков  $N_{t.p.}$ :

$$G = G\{N_s(g_s), R, N_{t.p.}\}. \quad (1.1)$$

*Параметры ХТС* – это физические и химические величины, которые характеризуют особенности протекания различных физико-химических явлений в каждом ХТП, условия проведения и особенности инженерно-аппаратурного оформления каждого ХТП системы. Параметры ХТС подразделяют на конструкционные и технологические.



Рис. 1.1. Схема ХТС как объекта исследования

*Конструкционные параметры XTC* ( $\bar{K}$ ) – это геометрические характеристики конструкций элементов системы (например, объем, площадь сечения, диаметр и высота аппарата; размеры слоя насадки в аппарате и т. д.). *Технологические параметры XTC* ( $\bar{D}$ ) – это физико-химические величины, которые характеризуют свойства, механизм и кинетику XTC, происходящие в элементах системы (например, константы скорости химических реакций, коэффициенты тепло- и массопередачи и т. д.). *Параметры технологического режима*  $\bar{W}$  – это основные физико-химические факторы внутри элементов системы, которые влияют на скорость XTC, на выход и качество химических продуктов (например, температура, давление, гидравлические условия перемещения потоков компонентов, концентрации веществ, активность катализатора и т. д.).

*Выходные переменные XTC* ( $\bar{Y}$ ) – это параметры выходных технологических потоков (ТП) системы. Параметры  $i$ -го ТП подразделяются на *параметры состояния потока* (массовый расход  $m_i$ ; объемный расход  $v_i$ ; концентрации химических компонентов  $x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{iN}$ ; давление  $p_i$ ; температура  $t_i$ ; расход теплоты  $Q_i$  и т. д.) и *параметры свойств потока* (теплоемкость  $c_i$ , вязкость  $\mu_i$ , плотность  $\rho_i$  и т. д.). Каждый  $i$ -й ТП характеризуют определенным числом независимых параметров, которое называют *параметричностью потока*  $\pi_i$ . В общем случае для произвольных XTC параметричность различных ТП не является одинаковой, т. е.  $\pi_i \neq \pi_j$ .

*Входные переменные XTC* ( $\bar{X}$ ) – это параметры входных ТП системы, а также параметры различного рода физико-химических воздействий окружающей среды на XTC (температура, давление, влажность, радиоактивное излучение и т. п.).

При математическом моделировании XTC используют понятия: состояние XTC, пространство состояний XTC, переменные состояния. *Состояние XTC* – это набор выходных переменных XTC, который полностью характеризует функционирование системы в каждый момент времени  $\tau$  (рис. 1.2). *Пространство состояний XTC* – это вся совокупность наборов выходных переменных XTC на некотором интервале времени наблюдений  $\Delta t$ . Выходные переменные XTC часто также называют *переменными состояния*, или *фазовыми переменными*.

Состояние системы зависит от технологической структуры и параметров XTC, от параметров технологического режима ее элементов и от воздействия на XTC входных переменных. Математическую модель XTC, которая отображает состояние системы, можно записать в следующем формальном виде:

$$\bar{Y} = \bar{F}(\bar{X}, G, \bar{K}, \bar{D}, \bar{W}, \tau), \quad (1.2)$$

где  $\bar{F}$  – векторная функция векторных аргументов  $\bar{X}, \bar{K}, \bar{D}, \bar{W}$  и скалярного аргумента  $\tau$  (время), которая зависит также от особенностей технологической

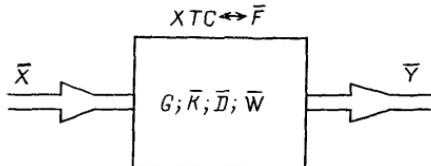


Рис. 1.2. Схема XTC как объекта математического моделирования:

$\bar{X}$  – вектор входных переменных;  $\bar{Y}$  – вектор выходных переменных, или переменных состояния XTC;  $G$  – технологическая топология;  $\bar{K}$  – вектор конструкционных параметров;  $\bar{D}$  – вектор технологических параметров;  $\bar{W}$  – вектор параметров технологического режима;  $\bar{F}$  – векторная функция;  $\leftrightarrow$  – математический символ «соответствие»

структуре XTC ( $G$ ). Векторная функция  $\bar{F}$  считается принадлежащей некоторому классу функций, допускающему существование решения уравнения (1.2), которое можно найти с использованием либо аналитических, либо численных методов.

Каждая XTC обладает разнообразными свойствами. Свойство XTC – это определенная специфическая характеристика системы, которая обуславливает особенности ее функционирования, различие или сходство системы с другими системами и проявляется либо во взаимосвязях между элементами данной XTC, либо во взаимодействии этой системы с другими XTC и окружающей средой. К важнейшим свойствам XTC относятся: надежность, безопасность, чувствительность, устойчивость и др. Количествоенную информацию о состоянии XTC и о свойствах XTC можно получить либо экспериментально в условиях эксплуатации системы, либо расчетным способом, используя определенную математическую модель (ММ) системы. Для наглядного представления многомерные массивы этой информации в различные моменты времени и при различных условиях должны быть сведены к ограниченному числу некоторых оценок, или количественных характеристик каждого свойства XTC, которые также называют показателями свойств XTC.

Каждый показатель свойства XTC ( $S$ ) должен удовлетворять, по крайней мере, следующим требованиям: 1) представлять собой величину, которая зависит от состояния XTC и довольно просто вычисляется с использованием определенной ММ системы на ЭВМ; 2) давать наглядное количественное представление об одном из свойств XTC; 3) допускать в пределах возможного простую приближенную оценку своих значений по экспериментальным данным.

Качество функционирования XTC можно охарактеризовать совокупностью свойств, определяющих техническое состояние и степень пригодности данной системы к выполнению заданных целей функционирования.

Для оценки качества функционирования XTC используют разнообразные критерии эффективности. Критерий эффективности (КЭ) XTC ( $\psi$ ) – это некоторый показатель, по которому оценивают степень приспособленности XTC к выполнению по-

ставленных целей функционирования. КЭ необходимы для определения оптимальных параметров элементов и технологических режимов ХТС, для сравнительной оценки альтернативных вариантов ХТС при решении задач реконструкции и проектирования объектов химической промышленности, для сравнительной оценки качества различных алгоритмов управления ХТС и т. д.

КЭ, чтобы достаточно полно определять качество функционирования ХТС, должен учитывать особенности технологической топологии и основные свойства системы, а также технологические режимы ее функционирования и условия взаимодействия ХТС с окружающей средой. В общем случае КЭ представляет собой некоторый функционал:

$$\psi = \psi(G, \bar{K}, \bar{D}, \bar{X}, \bar{Y}, \bar{W}, \bar{S}), \quad (1.3)$$

где  $G$  – технологическая топология;  $\bar{K}$  ( $\bar{D}$ ) – вектор конструкционных (технологических) параметров;  $\bar{X}$  ( $\bar{Y}$ ) – вектор входных (выходных) переменных;  $\bar{W}$  – вектор параметров технологического режима элементов;  $\bar{S}$  – вектор показателей свойств системы.

Зависимости вида (1.3) для КЭ сложных ХТС с учетом широкого круга действующих факторов, как правило, являются весьма громоздкими. Расчет значений КЭ сложной ХТС требует разработки специальных алгоритмов и применения быстродействующих ЭВМ.

В условиях эксплуатации при воздействии на ХТС разного рода возмущений возникает необходимость управлять системой, т. е. выполнять определенное изменение состояния данной ХТС, ведущее к достижению поставленных целей функционирования в соответствии с выбранным КЭ (1.3).

В общем случае автоматизированное управление процессом функционирования ХТС осуществляется на двух иерархических уровнях: технологическом – с использованием различных автоматизированных систем управления технологическими процессами (АСУТП); организационно-хозяйственном – с использованием различных АСУ производствами или предприятиями (АСУП).

Каждая автоматизированная технологическая установка (производство), технологический узел и технологический блок как кибернетическая система представляют собой совокупность определенного вида ХТС и определенной АСУ, которые, действуя совместно, обеспечивают либо выполнение некоторой технологической операции переработки вещества и энергии, либо получение требуемых продуктов и полупродуктов.

## 1.2. ВИДЫ ТИПОВЫХ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ ХТС

При исследовании ХТС каждый ее элемент, в котором протекает определенный ХТП, рассматривают как *технологический оператор* (ТО), качественно и (или) количественно преобразующий параметры входных ТП данного  $k$ -го элемента ХТС  $\bar{X}^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$  в параметры его выходных ТП  $\bar{Y}^{(k)} = (y_1^{(k)}, y_2^{(k)}, \dots, y_m^{(k)})$  (рис. 1.3). Так, реактор, в котором протекает экзотермическая реакция  $A + B \rightarrow C + Q$ , представляет собой ТО, осуществляющий как качественное (выходной ТП содержит новую химическую компоненту), так и количественное (температура выходного потока выше температуры входного потока) преобразование параметров входного ТП, содержащего две химические компоненты. Рекуперативный теплообменник является ТО, осуществляющим количественное преобразование температур входных ТП. В общем случае для  $k$ -го ТО как число его входных и выходных ТП, так и их параметричности неодинаковы.

Таким образом, каждый элемент ХТС представляет собой многомерный ТО, математическую модель которого можно представить в следующем формальном виде:

$$\bar{Y}^{(k)} = \bar{F}^{(k)}(\bar{X}^{(k)}, \bar{K}^{(k)}, \bar{D}^{(k)}, \bar{W}^{(k)}), \quad (1.4)$$

где  $\bar{F}^{(k)}$  – вектор-функция;  $\bar{X}^{(k)}(Y^{(k)})$  – вектор входных (выходных) переменных;  $\bar{K}^{(k)}(\bar{D}^{(k)})$  – вектор конструкционных (технологических) параметров элемента;  $\bar{W}^{(k)}$  – вектор параметров технологического режима;  $k$  – номер элемента.

Каждый ХТП, протекающий в определенном элементе ХТС, представляет собой совокупность типовых процессов химической технологии. При исследовании ХТС любой типовой процесс химической технологии рассматривают как *типовую ТО*. Таким

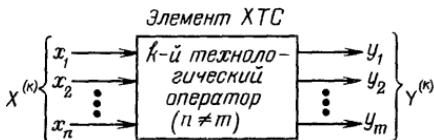


Рис. 1.3. Схема элемента ХТС как технологического оператора:  
 $\bar{X}^{(k)}(\bar{Y}^{(k)})$  – вектор входных (выходных) переменных элемента ХТС;  $x_i(y_j)$  –  $i$ -я координата вектора  $\bar{X}^{(k)}(\bar{Y}^{(k)})$ ;  $k$  – номер элемента

образом, любой ТО исследуемой ХТС представляет собой определенную совокупность типовых ТО. Типовые ТО разделяют на два класса: основные и вспомогательные. *Основные ТО* отображают основные химические и физические превращения, происходящие при преобразовании веществ и энергии в элементах ХТС. *Вспомогательные ТО* отображают энергетические и фазовые явления, сопровождающие разнообразные преобразования вещества и энергии в элементах ХТС. Классификация и условные изображения типового ТО представлены на рис. 1.4.

В зависимости от целей исследования ХТС каждый ее элемент, или ТО, можно рассматривать либо при весьма упрощенном

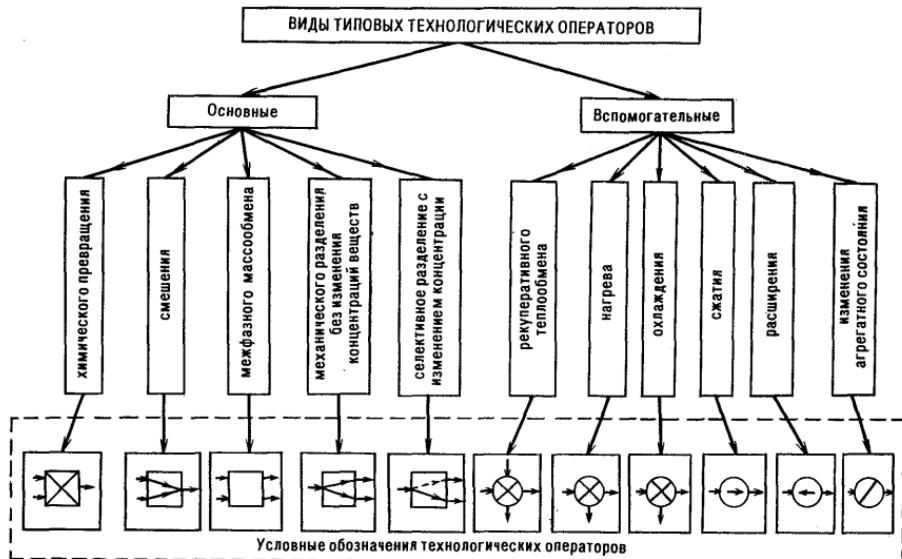


Рис. 1.4. Классификация и условные изображения типовых технологических операторов XTC

анализе как один типовой ТО (табл. 1.1), либо при более подробном анализе как совокупность нескольких типовых ТО. Так, адиабатический реактор, в котором происходит экзотермическая реакция между реагентами, содержащимися в двух входных ТП, как ТО представляет собой совокупность трех типовых ТО: смешения, химического превращения и нагрева. Конденсатор в качестве ТО можно рассматривать для потока пара как типовые ТО охлаждения и изменения агрегатного состояния, а для

Таблица 1.1. Применение типовых технологических операторов для отображения основных физико-химических явлений в некоторых элементах XTC

Типовые ТО	Сущность отображаемых физико-химических явлений	Отображают основные явления в определенных элементах XTC
Химического превращения	Химическая реакция для веществ одного или нескольких входных ТП	Реакторы, кристаллизаторы, автоклавы, конверторы, адсорбера
Межфазного массообмена	Процесс межфазного массообмена между двумя входными потоками	Адсорбера, адсорбера, экстракторы, аппараты для выщелачивания, выпарные аппараты
Смешения	Механическое смешение расходов входных потоков	Резервуары, тройники трубопроводов, сопла, струйные смесители
Механического разделения	Механическое разделение расхода одного потока без изменения концентраций веществ в выходных потоках	Резервуары, тройники трубопроводов

Типовые ТО	Сущность отображаемых физико-химических явлений	Отображают основные явления в определенных элементах ХТС
Селективного (диффузионного) разделения	Селективное разделение смеси веществ с изменением концентрации веществ в выходных потоках	Колонны дистилляции, колонны ректификации, фильтры, десорбераы, отстойники, декантаторы, центрифуги, сушилки, классификаторы
Рекуперативного теплообмена	Теплообмен между двумя входными потоками	Рекуперативные теплообменники, холодильники, нагреватели
Нагрева – охлаждения	Подвод (отвод) теплоты в результате физико-химических превращений внутри элемента; сжигание топлива; подвод холода	Реакторы, конденсаторы, испарители, сепараторы, печи, эжекторы, турбодетандеры, дроссели
Сжатия (расширения)	Повышение (понижение) давления некоторого потока вещества	Насосы, воздуходувки, компрессоры, инжекторы, эжекторы, дроссели
Изменения агрегатного состояния	Изменение агрегатного состояния выходного потока	Конденсаторы, испарители, сушилки, выпарные аппараты, пени-плавилки

потока жидкости как типовой ТО нагрева. Ректификационную колонну можно представить либо как типовой ТО селективного, в частности диффузионного разделения смеси, либо как совокупность нескольких типовых ТО межфазного массообмена и рекуперативного теплообмена. Пароэжекторную холодильную установку ХТС как ТО можно отобразить в виде совокупности типовых ТО – расширения (создание вакуума) и охлаждения (снижение температуры кипения жидкости).

### 1.3 КЛАССИФИКАЦИЯ ХТС ПО ОСОБЕННОСТИЯМ ТЕХНОЛОГИЧЕСКОЙ ТОПОЛОГИИ

Исходя из особенностей технологической топологии, ХТС классифицируют по видам элементов и типам технологических связей. В зависимости от видов элементов, или ТО, входящих в структуру ХТС, выделяют однородные и неоднородные ХТС.

Однородные ХТС состоят из одного вида элементов, в которых протекают одинаковые ХТП. Так, однородными ХТС являются реакторные системы (РС), теплообменные системы (ТС), системы ректификации (СР) многокомпонентных смесей, системы абсорбции (СА), системы экстракции (СЭ) и др. Однородные ХТС, как правило, соответствуют технологическим блокам производств.

Неоднородные ХТС состоят из разного вида элементов, в которых протекают различные ХТП. Неоднородные ХТС соответствуют либо технологическим узлам производств, в которых реализуются отдельные основные технологические операции (подготовка сырья, химический синтез молекул продуктов и

полупродуктов, выделение целевых продуктов), либо технологическим установкам (производствам), выпускающим определенные продукты.

Любую автоматизированную сложную ХТС (СХТС), соответствующую технологической установке, или производству для выпуска некоторого продукта и полупродуктов, можно рассматривать как трехуровневую (трехслойную или трехранговую) иерархическую систему. Для строго упорядоченной функционально-организационной структуры иерархической СХТС характерна следующая особенность: совокупность нескольких элементов или подсистем каждого нижнего  $i$ -го уровня иерархии образует одну подсистему следующего верхнего  $(i+1)$ -го уровня иерархии СХТС.

Основу 1-го уровня иерархической структуры СХТС образуют отдельные элементы или ХТП и локальные системы автоматического управления (САУ) ХТП. Основу 2-го уровня образуют однородные малые ХТС (МХТС), соответствующие технологическим блокам, и АСУ ТП этих блоков. Основу 3-го уровня иерархической структуры СХТС образуют неоднородные ХТС, соответствующие отдельным технологическим узлам производства и АСУ ТП этих узлов.

Взаимодействие между отдельными типовыми ТО, отображающими функционирование каждого элемента ХТС, а также между различными ТО и подсистемами данной ХТС осуществляется с помощью технологических связей (или соединений), каждой из которых соответствует определенный ТП.

Технологическую топологию ХТС отображают, используя разнообразные схемы: технологические, структурные, операторные и функциональные.

Технологическая схема ХТС – это такой чертеж, на котором каждый элемент системы представлен в виде стандартного гра-

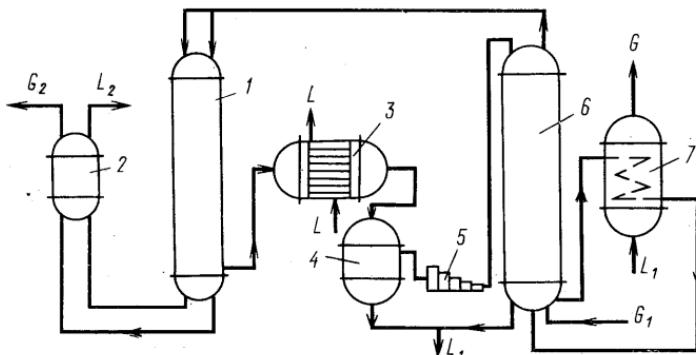


Рис. 1.5. Технологическая схема ХТС синтеза аммиака:

1 – колонна синтеза; 2 – паровой котел; 3 – холодильник; 4 – сепаратор; 5 – турбоциркуляционный компрессор; 6 – конденсационная колонна; 7 – испаритель; G – поток газа; L – поток жидкости

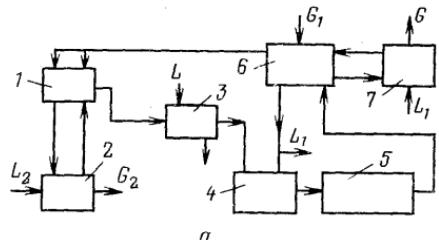
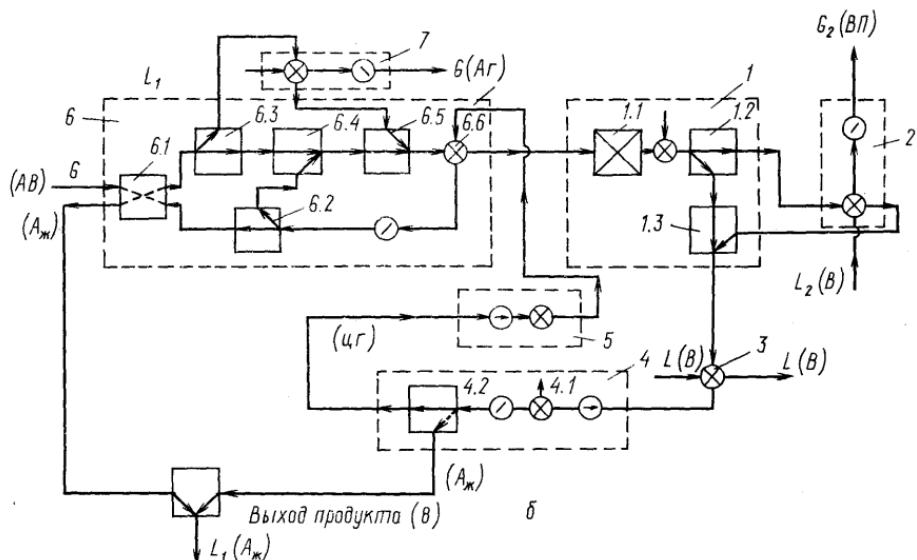


Рис. 1.6. Структурная (а) и операторная (б) схемы ХТС синтеза аммиака (номера блоков и технологических операторов соответствуют номерам аппаратов технологической схемы на рис. 1.5.):

АВ - азотоводородная смесь;  $A_g$  - газообразный аммиак;  $A_l$  - жидкий аммиак; В - вода; ВП - водяной пар; ЦГ - циркуляционный газ



фического изображения, а технологические связи даны в виде направленных линий (рис. 1.5), а также приведены краткие сведения о химических формулах, составах ТП и некоторые сведения о свойствах веществ, участвующих в ХТП.

Структурная схема ХТС – это такой чертеж, на котором каждый элемент ХТС упрощенно изображают в виде блока, имеющего несколько входов и выходов, а технологические связи между элементами – в виде направленных линий (рис. 1.6, а).

Операторная схема XTC – это такой чертеж, на котором каждый элемент изображают в виде совокупности нескольких типовых ТО, а взаимосвязи между типовыми ТО и технологические соединения между элементами изображают направленными линиями. Операторная схема XTC дает первоначальное представление о физико-химической сущности всех ХТП системы (рис. 1.6, б).

Функциональная схема ХС – это такой чертеж, на котором в виде блоков изображены основные технологические блоки и технологические узлы производства, каждый из которых представляет собой определенную функциональную подсистему, реа-

Рис. 1.7. Функциональная схема производства карбамида:

*П1* – подсистема подготовки аммиака; *П2* – подсистема подготовки диоксида углерода; *П3* – подсистема синтеза карбамида; *П4* – подсистема обработки плава; *П5* – подсистема очистки сточных вод и отходящих газов; *П6* – подсистема отдувки газа в смежные производства; *П7* – подсистема концентрирования раствора; *П8* – подсистема гранулирования и кристаллизации; *П9* – подсистема расфасовки и складирования

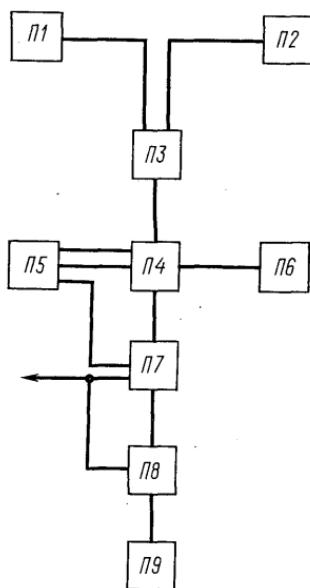
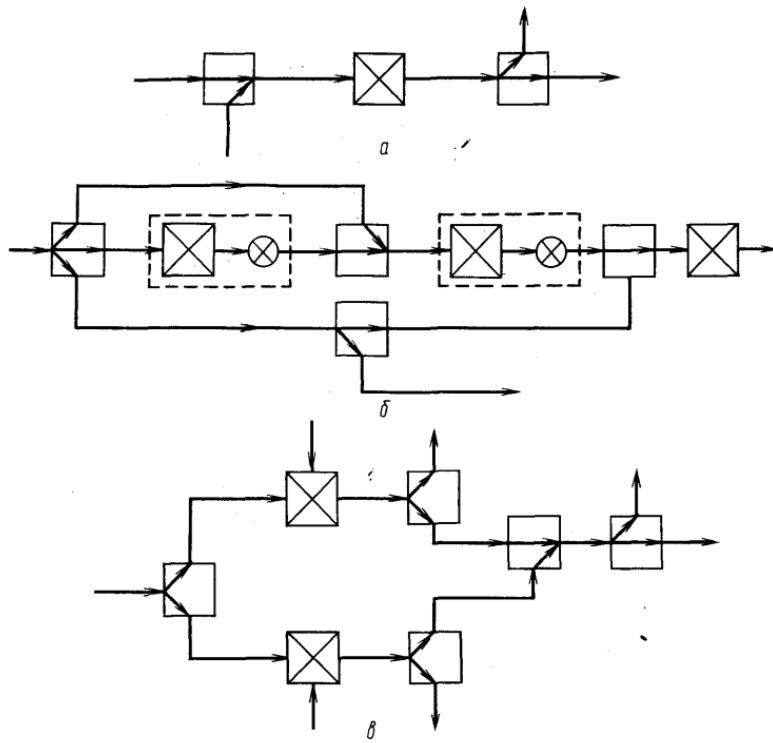


Рис. 1.8. Типовые технологические связи однонаправленных ХТС:

*а* – последовательная; *б* – последовательно-обводная, или байпас;

*в* – параллельная



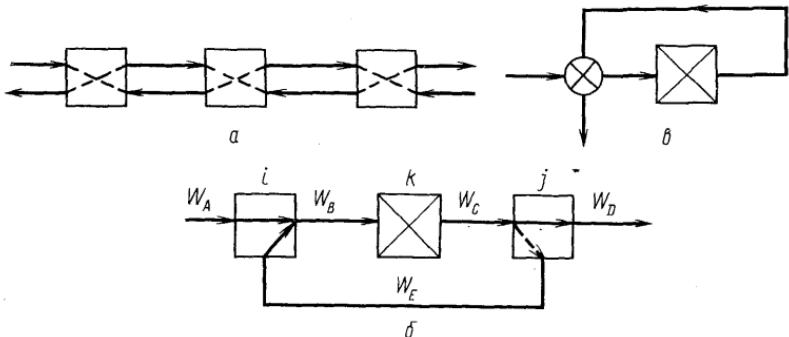


Рис. 1.9. Типовые технологические связи встречнонаправленных ХТС:

*a*—противонаправленная; *б*—обратная (рециклическая) по расходу вещества; *в*—обратная по расходу энергии;  $W_A$ ,  $W_B$ —основной технологический поток;  $W_B$ ,  $W_C$ —главный ТП;  $W_E$ —обратный ТП; *i*, *k*, *j*, *E*—элементы ХТС

лизующую какую-либо основную технологическую операцию, или стадию производства (рис. 1.7).

Для технологической топологии ХТС характерны следующие *типы технологических связей*: последовательная (рис. 1.8, *а*); последовательно-обводная, или байпас (рис. 1.8, *б*); параллельная (рис. 1.8, *в*); противонаправленная (рис. 1.9, *а*); обратная (рециклическая) по расходу вещества (рис. 1.9, *б*); обратная по расходу энергии (рис. 1.9, *в*); энерго-трансформационная (рис. 1.10).

В зависимости от типа технологических связей в структуре ХТС выделяют односторонние и встречнонаправленные ХТС. *Односторонние ХТС*—это системы, содержащие односторонние технологические связи, последовательные, последовательно-обводные и параллельные. Односторонние ХТС могут

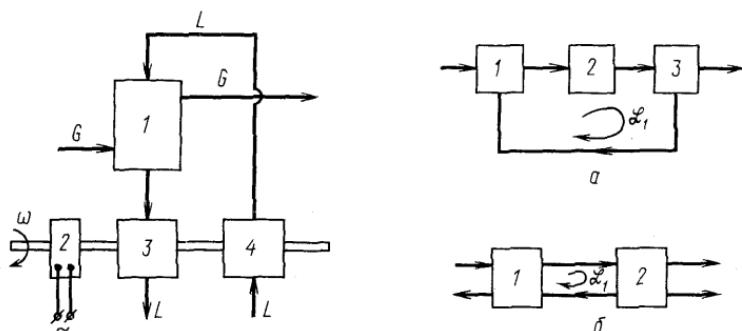


Рис. 1.10. Структурная схема ХТС, которая содержит энерготрансформационную связь, реализованную в виде агрегата «двигатель–насос–турбина»:

1—алсорбер высокого давления; 2—двигатель; 3—насос; 4—турбина

Рис. 1.11. Структурные схемы различных простых контурных ХТС:

*а*—одноконтурной с обратной технологической связью— $L_1 = (1, 2, 3, 1)$ ; *б*—одноконтурной с противоточной технологической связью— $L_1 = (2, 1, 2)$ ;  $L_1$ —простой контур

быть простыми и сложными. *Простые односторонние ХТС* в своей структуре содержат односторонние технологические связи только одного типа. *Сложные односторонние ХТС* в своей структуре имеют односторонние технологические соединения разного типа.

*Встречнонаправленные, или контурные ХТС* – это системы, содержащие противонаправленные, обратные и энерготрансформационные технологические связи.

Встречнонаправленные ХТС могут быть простыми и сложными контурными системами. *Простые контурные, или односторонние ХТС* в своей структуре содержат один простой контур (рис. 1.11). Простой контур представляет собой замкнутую совокупность элементов ХТС, при обходе которой в направлении технологических потоков никакой элемент, кроме одного начального, дважды не повторяется. Простой  $i$ -й контур  $L_i$  ХТС можно задать перечислением номеров образующих его элементов:  $L_i = \{n_1, n_2, \dots, n_k, \dots, n_l\}$ , где  $n_1$  ( $n_k$ ) – номер начального ( $k$ -го) элемента контура.

*Сложные контурные, или многоконтурные, ХТС* могут быть упорядоченными и взаимосвязанными. Упорядоченные многоконтурные ХТС содержат в своей структуре произвольное число упорядоченно расположенных, или строго соподчиненных в определенном направлении одноконтурных подсистем (рис. 1.12, а и б).

*Взаимосвязанные многоконтурные ХТС* имеют в своей структуре различное число произвольно взаимосвязанных одноконтурных подсистем (рис. 1.12, в), содержащих общие элементы, которые принадлежат одновременно нескольким различным подсистемам.

В общем случае технологическая топология сложных ХТС содержит произвольную комбинацию различных односторонних и встречнонаправленных технологических связей.

Тип технологических связей существенно влияет на значения различных технологических и технико-экономических показателей (ТЭП) эффективности функционирования ХТС, а также на значения показателей свойств ХТС.

Рассмотрим структурную схему многоконтурной ХТС производства продукта  $R$  по химической реакции  $A \rightleftharpoons R$  (рис. 1.13). Технологический поток сырья  $A$  поступает в реактор 1, где превращается в продукт  $R$ . Непрореагированное количество компонента  $A$  вместе с продуктом  $R$  выходит из реактора. Затем к выходному потоку реактора добавляется обратный ТП растворителя  $S$ , и их смесь поступает в экстрактор 2. Растворитель  $S$  лишь частично смешивается с компонентом  $A$  и очень близок по свойствам к продукту  $R$ . В экстракторе 2 образуются два жидкофазных потока. ТП экстракта, содержащий растворитель  $S$  и продукт  $R$ , поступает в колонну дистилляции 3. Поток рафината, обогащенный компонентом  $A$ , направляется в дистил-

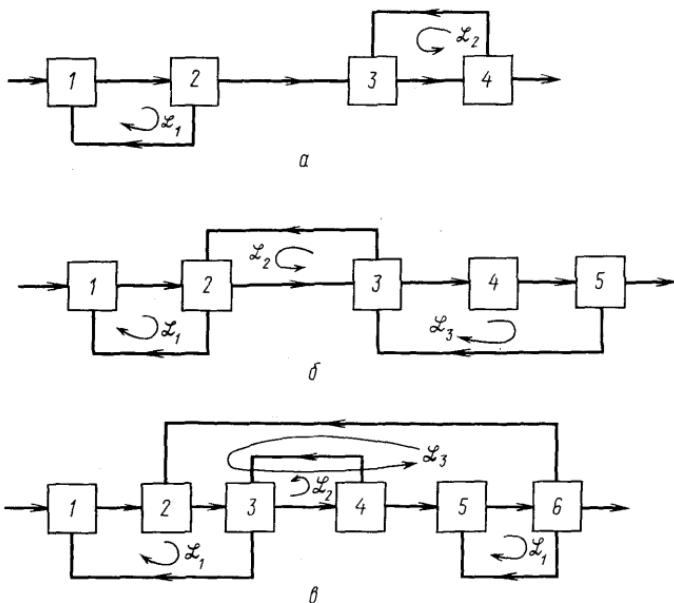


Рис. 1.12. Структурные схемы различных сложных контурных, или многоконтурных XTC:

*α*-упорядоченная двухконтурная XTC  $L_1 = (1, 2, 1)$  и  $L_2 = (4, 3, 4)$ ; *β*-упорядоченная трехконтурная XTC  $L_1 = (2, 1, 2)$ ,  $L_2 = (3, 2, 3)$  и  $L_3 = (3, 4, 5, 3)$ ; *γ*-взаимосвязанная многоконтурная XTC  $L_1 = (2, 3, 1, 2)$ ,  $L_2 = (3, 4, 3)$ ,  $L_3 = (6, 2, 3, 4, 5, 6)$  и  $L_4 = (5, 6, 5)$ ;  $L_i$ -*i*-й простой контур

ляционную колонну 4. ТП, выходящий из нижней части дистилляционной колонны 4, содержащий только компонент  $A$ , направляется в виде обратного ТП на вход XTC и, смешиваясь со входным ТП сырья, поступает в реактор 1.

Обычно все ТП содержат некоторое количество примесей. Если такой ТП направить в рецикл, то эти примеси будут

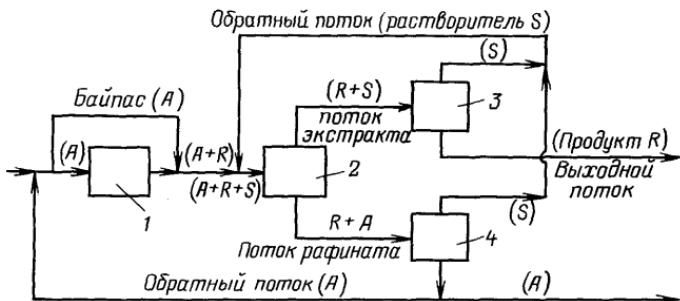


Рис. 1.13. Структурная схема многоконтурной XTC производства продукта  $R$  по химической реакции  $A \rightleftharpoons R$ :

1—химический реактор; 2—экстракционная колонна; 3, 4—колонна дистилляции

накапливаться в ХТС. Следовательно, необходимо отделить некоторую часть обратного ТП и удалить ее из ХТС. Байпас используется в том случае, если концентрация компонента *A* должна быть низкой в реакторе 1 и достаточно высокой в экстракторе 2. Кроме того, байпас позволяет обеспечить управление ХТП и предотвратить потери продукта. Если, например, вещество *A* стоит дешево, а продукт *R* — очень дорого, то можно сознательно допустить, чтобы в продукте *R* присутствовало некоторое количество исходного реагента *A*.

Повышение эффективности функционирования ХТС может быть достигнуто либо путем повышения показателей качества функционирования основных ТО и изменения технологических связей между существующими в системе ТО, либо в результате введения дополнительных ТО и создания новых технологических связей в системе.

Для осуществления заданной цели функционирования в ХТС можно использовать различные виды технологических связей между элементами. В качестве примера рассмотрим два альтернативных варианта технологической топологии ХТС изомеризации *n*-бутана (рис. 1.14).

В односторонней ХТС с байпасом (рис. 1.14, *a*) *n*-бутан поступает в каталитический реактор 1 и там изомеризуется при определенной степени превращения. Продукты реакции поступают в ректификационную колонну 2, где разделяются на верхний продукт, состоящий из изобутана требуемой чистоты, и нижний — *n*-бутан, который изомеризуется в каталитическом реакторе 3. Продукт изомеризации из реактора 3 соединяется в смесителе 4 с верхним продуктом и выходит из последнего.

Изомеризация *n*-бутана может быть также осуществлена во встречнопротивоточном ХТС с обратной технологической связью (рис. 1.14, *b*). Технологический поток *n*-бутана поступает в смеситель

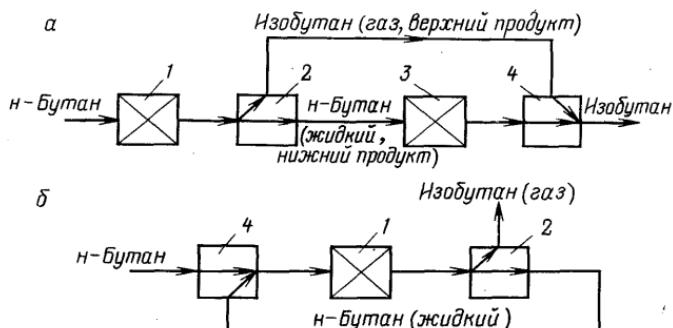


Рис. 1.14. Различные виды технологической топологии ХТС изомеризации *n*-бутана:

*a* — односторонняя ХТС с байпасом; *b* — встречнопротивоточная ХТС с обратной технологической связью; 1 — каталитический реактор; 2 — ректификационная колонна; 3 — каталитический реактор; 4 — смеситель

тель 4, где смешивается с нижним продуктом из ректификационной колонны 2, и направляется в реактор 1, где изомеризуется при определенной степени превращения. Продукты изомеризации из реактора 1 поступают в колонну 2, где происходит разделение готовой продукции (верхний продукт) и рециркуляционной смеси (нижний продукт). Выбор оптимальной технологической топологии ХТС, обеспечивающей экстремальное значение некоторого КЭ (1.3), является важнейшим этапом проектирования ресурсосберегающих химических производств.

#### 1.4. КЛАССИФИКАЦИЯ ХТС ПО СПОСОБУ ФУНКЦИОНИРОВАНИЯ

Исходя из особенностей способа функционирования отдельных ХТП и ХТС в целом, который характеризуется на определенном интервале времени законом изменения входных и выходных переменных ХТС, а также составом выпускаемой продукции, выделяют основные классы ХТС: непрерывные и периодические: ХТС для производства строго определенных продуктов и ХТС для производства многоассортиментной продукции.

По способу функционирования ХТС для производства строго определенных продуктов выделяют следующие классы ХТС: непрерывные, непрерывно-циклические и непрерывно-периодические. Непрерывные ХТС – это такие системы, способ функционирования которых на любом интервале времени характеризуется стационарным непрерывно-произвольным изменением или постоянством переменных состояния каждого отдельного ХТП и ХТС в целом. Непрерывные ХТС позволяют получать большое количество однородного продукта с единицы объема аппаратов, а также сократить непроизводительные потери топливно-энергетических ресурсов и сырья, обеспечивают возможность полной автоматизации всех ХТП. Примерами непрерывных ХТС являются крупнотоннажные ХТС производства карбамида, капролактама, аммиака, серной кислоты, фенола, этилена, хлорметанов и др.

Непрерывно-циклические ХТС – это такие системы, для которых характерно стационарное непрерывно произвольное изменение или постоянство входных переменных и переменных состояния в целом при циклическом изменении во времени как переменных состояний некоторых ХТП, так и технологической топологии ряда подсистем. Примером непрерывно-циклических ХТС являются подсистемы адсорбции сырья или продуктов, регенерации теплоты внутренних ТП системы и др.

Непрерывно-периодические ХТС – такие системы, у которых входные переменные и переменные состояния отдельных ХТП и ХТС в целом, а также технологическая топология системы периодически изменяются во времени. В структуру таких ХТС входят как непрерывные, так и периодические ХТП. Примером непрерывно-периодической является ХТС полимеризации винил-

хлорида из сусpenзии, в такой ХТС реакторный блок работает непрерывно, а технологические блоки демономеризации и сушки поливинилхлорида работают периодически.

В ряде отраслей химической, нефтеперерабатывающей, нефтехимической и фармацевтической промышленности широко распространены малотоннажные производства многоассортиментной продукции. Для этих производств характерны изменяющийся ассортимент малотоннажной продукции, множество видов перерабатываемого уникального сырья, а также сложность и неоднозначность маршрутов химического синтеза продуктов, разнообразные типо-конструкции аппаратов многофункционального назначения, преимущественно периодические ХТП, наличие вспомогательных организационно-технических операций (загрузка, выгрузка, очистка аппаратов, пуск, останов и др.).

Наибольшая мобильность присуща ассортименту таких классов химических продуктов, как лакокрасочные материалы, синтетические красители, органические промежуточные продукты, химические реагенты и особо чистые вещества, медикаменты, химические средства защиты растений и т. п.

Периодические ХТС для выпуска многоассортиментной продукции, способ функционирования которых характеризуется периодическим законом изменения во времени входных переменных и переменных состояния отдельных ХТП и ХТС в целом, подразделяют на следующие классы: индивидуальные, совмещенные и гибкие. В структуру периодических ХТС для согласования во временных режимах работы отдельных периодических ХТП может входить большое число резервуаров, или емкостей.

Индивидуальные ХТС – это такие системы, которые в разные периоды времени в зависимости от видов сырья позволяют выпускать, используя одни и те же элементы при определенных жестких технологических связях между элементами и при заданных режимах функционирования периодических ХТП, один вид продуктов. Обычно в индивидуальных ХТС циклически производят подряд несколько партий одного продукта. Примерами индивидуальных ХТС являются производства эпоксидных смол, красителей и др.

Совмещенные многоассортиментные ХТС (СМ-ХТС) – это многоассортиментные системы, которые в зависимости от видов сырья в различные периоды времени позволяют выпускать, используя одни и те же элементы (аппараты) при определенных жестких технологических связях между этими элементами и заданных режимах работы периодических ХТП, одновременно несколько видов продуктов. Для СМ-ХТС характерны высокие значения коэффициентов использования технологического оборудования и возможность применения крупнотоннажных аппаратов.

Следует, однако, отметить, что СМ-ХТС имеют ряд недостатков, связанных с необходимостью останова оборудования для

промывания и очистки при переходе с выпуска одного ассортимента продуктов на другой, с возможностью загрязнения одного продукта другим, с некоторыми потерями продукции при смене ассортимента, с трудностями подбора оптимального ассортимента выпускаемых продуктов, с выбором оборудования из-за различия параметров ХТП при производстве разных продуктов. Несмотря на это, использование оптимально организованных СМ-ХТС для производства малотоннажных продуктов является несомненно экономически выгодным, в частности для производства химических реагентов, органических красителей и промежуточных продуктов, пестицидов и др.

Гибкие многоассортиментные ХТС (ГМ-ХТС) – это такие многоассортиментные системы, которые в различные периоды времени в зависимости от видов сырья позволяют выпускать, используя определенный набор элементов (что обусловлено изменением состава элементов и периодических ХТП, изменением структуры технологических связей между ними, а также перенастройкой технологических режимов функционирования ХТП), одновременно различные совокупности нескольких видов продуктов. ГМ-ХТС принципиально дают возможность существенно интенсифицировать и повысить ТЭП производств различных малотоннажных продуктов.

## 1.5 ПОНЯТИЯ МАЛООТХОДНЫХ И РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ХТС

*Ресурсосбережение* – это взаимосвязанная совокупность научно-методологических, технологических, инженерно-технических, организационно-технических, экономических и организационно-хозяйственных мероприятий, направленных при производстве разнообразных продуктов на сбережение и рациональное использование природных ресурсов; на значительное повышение степени переработки и резкое сокращение потерь материальных ресурсов, наиболее полную рекуперацию вторичных материальных ресурсов и отходов, что приводит к существенному росту экономической эффективности промышленного производства и предотвращает его вредное воздействие на окружающую среду.

Ресурсосбережение позволяет не только сберечь природные и материальные ресурсы для будущих поколений, растянуть на значительно более длительные сроки их рациональное использование и обеспечить охрану окружающей среды, но также открывает широчайшие возможности для увеличения объема выпуска высококачественной продукции при тех же или даже меньших затратах общественного труда и экономии капитальных вложений.

Важным показателем эффективности ХТС и уровня ресурсосбережения в химических отраслях промышленности является материлоемкость продукции. *Материлоемкость продукции* – это удельный расход всех видов материальных ресурсов, необхо-

димых для изготовления единицы какой-либо продукции, который выражается либо в натуральных показателях, либо в процентах стоимости использованных материальных ресурсов в себестоимости продукции. Снижение материалоемкости химической продукции позволяет повысить уровень ресурсосбережения в промышленности.

Одним из важных направлений ресурсосбережения в химической промышленности является *энергосбережение*. Энергосбережение достигается в результате реализации в промышленности: научно обоснованных оптимальных удельных норм расхода топлива, тепловой и электрической энергии для производства различных видов химической продукции; способов ликвидации потерь ТЭР; способов утилизации вторичных энергоресурсов; способов комбинированной выработки энергии (технологического пара и электроэнергии) в ХП; организационно-хозяйственных мероприятий по рациональному расходованию всех видов ТЭР на предприятиях; в результате применения современных термодинамических принципов и методов синтеза высокоеффективных химико-энергетических систем, а также прогрессивного производственного опыта. Ресурсосбережение представляет собой одну из главных концепций безотходной технологии.

*Безотходная технология* – это идеальный способ промышленного производства разнообразных видов продукции, обеспечивающий сбережение и наиболее рациональное использование всех компонентов природных ресурсов, практически полностью исключающий образование отходов и не наносящий ущерба окружающей среде. Безотходная технология позволяет создавать принципиально новые антропогенные безопасные для окружающей среды глобальные ресурсные циклы, которые включают взаимосвязанную совокупность различных перемещений природных веществ, используемых человеком на различных этапах развития общества.

Основным структурным компонентом безотходной технологии как идеального способа промышленного производства продукции является безотходное промышленное производство. Безотходное промышленное производство – это идеальный полностью безопасный для окружающей среды взаимосвязанный комплекс разнообразных производств различных видов продуктов, практически исключающий образование отходов. В структуру безотходного промышленного производства, как правило, входят различные безотходные, малоотходные и ресурсосберегающие ХТС.

*Безотходная ХТС* – это идеальная полностью безопасная для окружающей среды ХТС производства основных и побочных химических продуктов, полностью исключающая образование неперерабатываемых и вредных отходов.

*Малоотходная ХТС* – это ХТС производства одного или нескольких химических продуктов, обеспечивающая образование

минимального количества выбросов, отходов, не оказывающих вредного воздействия на окружающую среду.

*Ресурсосберегающая ХТС* – это ХТС, не оказывающая вредного воздействия на окружающую среду и обеспечивающая минимальную материалоемкость выпускаемых продуктов заданного количества и требуемого качества.

Нами рассматриваются ресурсосберегающие ХТС, которые в антропогенных экологически безопасных глобальных ресурсных циклах относятся только к этапу химической переработки материальных ресурсов в продукты, не включающему переработку отходов и разнообразные способы утилизации этих продуктов либо после их использования по прямому назначению, либо после их морального и физического старения. Ресурсосберегающие ХТС представляют собой сложные многоконтурные ХТС, в структуру которых входят высокоэффективные ХТП и высокointенсивные аппараты химической технологии. Важнейшим классом ресурсосберегающих и малоотходных ХТС являются химико-энергетические системы.

*Химико-энергетические системы (ХЭТС)* – это такие ХТС, в которых различные ХТП, осуществляющие химические и физические преобразования веществ с выделением и поглощением большого количества теплоты, тесно взаимодействуют с определенными теплотехническими и теплоэнергетическими процессами, что обеспечивает требуемый выпуск высококачественной химической продукции с желаемыми технологическими показателями, а также эффективное использование разнообразных ТЭР и охрану окружающей среды от загрязнений.

В структуру ХЭТС входит наряду с высокоэффективными аппаратами и машинами химической технологии разнообразное специальное теплотехническое и энергетическое оборудование: парогенераторы, котлы-утилизаторы, экономайзеры, турбогенераторы, газовые и паровые турбины, печи, абсорбционно-холодильные установки, тепловые насосы и т. п. Примерами являются крупнотоннажные ХЭТС производства аммиака, слабой азотной кислоты, метанола, фталевого и малеинового ангидридов и др.

## 1.6 ВИДЫ КРИТЕРИЕВ ЭФФЕКТИВНОСТИ ХТС

В качестве критериев эффективности ХТС (1.3) используют как различные технико-экономические показатели (ТЭП), например прибыль, себестоимость, приведенные затраты и др., так и технологические показатели (например, производительность и мощность по выпуску продукции; термодинамический, экспергетический коэффициенты полезного действия (кпд); степени разделения; коэффициенты тепло- и массопередачи, степень превращения, удельные расходные нормы сырья и ТЭР и др.).

Кратко рассмотрим характеристику экономических КЭ. Для согласования разнообразных тенденций в процессе функционирования ХТС часто используют КЭ с ограничительными условиями. Например, такого рода экономическими КЭ для ХТС могут служить:

1) производительность при ограничении на требуемое качество и заданную себестоимость продуктов;

2) средняя себестоимость продукции при ограничении на заданную производительность и требуемое качество и т. п.

Необходимо отметить, что КЭ, содержащие ограничительные условия, имеют ряд недостатков, которые весьма сужают область их использования.

Для наиболее полной оценки эффективности функционирования ХТС, как правило, необходимо использовать обобщенные экономические КЭ, к которым относятся чистая продукция и приведенные затраты. Чистая продукция  $D_q$  равна:

$$D_q = \sum_i B_i \Pi_i - (M_3 + \mathcal{E}_3 + A), \quad (1.5)$$

где  $B_i$  – объем товарной продукции, т;  $\Pi_i$  – оптовая цена, руб/т,  $M_3$  ( $\mathcal{E}_3$ ) – стоимость материальных затрат (затрат на ТЭР), руб.;  $A$  – амортизационные отчисления, руб;  $i$  – вид продукции.

Величина приведенных затрат  $\Pi_3$  равна

$$\Pi_3 = Z_3 + EK_3, \quad (1.6)$$

где  $Z_3$  – суммарные эксплуатационные затраты, руб/год;  $E$  – нормальный коэффициент экономической эффективности капиталовложений (величина, обратная нормативному сроку окупаемости), год<sup>-1</sup>;  $K_3$  – капитальные затраты, руб.

При исследовании и проектировании сложных ХТС в зависимости от поставленных целей необходимо использовать как экономические, так и технологические КЭ. Правильно выбранные технологические КЭ не должны противоречить экономическим КЭ, поскольку в этом случае они являются их частными аналогами.

При проектировании оптимальных ХТС использование технологических КЭ позволяет исключить из рассмотрения большую часть нерациональных альтернативных вариантов проектируемой ХТС, которые весьма отличаются от оптимального. Как правило, технологические КЭ дают возможность найти рациональный вариант на самых низких иерархических уровнях ХТС и тем самым значительно сократить число альтернативных вариантов, которые участвуют в принятии решений на более высоких уровнях иерархии. Так, при выборе типа аппаратурного оформления ступени контакта для массообменного аппарата при прочих равных условиях отдают предпочтение типу ступени контакта с большим коэффициентом массопередачи, который в этом случае представляет собой технологический КЭ элемента ХТС. При заданном числе теоретических ступеней контакта в ректификационной колонне место ввода питания выбирают так,

чтобы обеспечить наилучшее качество продуктов разделения, которое в этом случае также играет роль технологического КЭ.

В последние годы значительные энергетические нагрузки крупнотоннажных ХЭТС и появление в их структуре специального теплотехнического и энергетического оборудования требуют при оценке эффективности ХЭТС учета не только количественных, но и качественных характеристик работоспособности потоков энергии в системе, которая оценивается величиной эксергии. Эта задача решается с позиций эксергетического анализа на основе использования как 1-го, так и 2-го законов термодинамики. Совмещение технико-экономического анализа с эксергетическим анализом эффективности ХЭТС привело к появлению новых термоэкономических КЭ, которые позволяют экономически оценить эффективность преобразования потоков эксергии в ХТС, а также термодинамическую степень совершенства процессов функционирования ХТС и ее отдельных элементов.

Качество функционирования каждого элемента или подсистемы некоторого иерархического уровня СХТС характеризуют определенным видом технологических КЭ. Технологическими КЭ отдельных элементов ХТС или ХТП являются значения разнообразных кпд, значения интенсивности и производительности этих ХТП. Кпд показывают степень приближения ХТП к равновесию. Примерами кпд ХТП являются: для реакторных процессов – степень превращения исходных реагентов, выход продукта, селективность; для массообменных процессов – степень разделения, степень поглощения, степень извлечения целевого продукта; для теплообменных процессов – тепловой кпд и эксергетический кпд.

Технологическими КЭ функционирования МХТС и СХТС в целом являются расходные нормы по сырью и ТЭР. Для оценки эффективности функционирования ХТС и СХТС используют также экономические КЭ – производительность, себестоимость продукции и приведенные затраты, материалоемкость продукции.

## 1.7. ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ХТС

Рассмотрим общую характеристику следующих основных свойств ХТС: надежность, безопасность, чувствительность, помехозащищенность, устойчивость, управляемость, эмерджентность и сложность.

*Надежность ХТС* – это свойство системы выполнять требуемые функции, сохраняя во времени значения установленных эксплуатационных показателей (производительность, качество продукции, расход материальных ресурсов и т. п.) в заданных пределах, соответствующих заданным режимам и условиям работы, технического обслуживания, ремонтов, хранения и транспортирования. *Надежность как комплексное свойство ХТС* в за-

висимости от целей функционирования и условий ее эксплуатации характеризуется отдельными частными свойствами, которыми являются безотказность, ремонтопригодность, долговечность и сохраняемость, либо сочетанием этих частных свойств как для ХТС, так и для образующих ее элементов и подсистем.

*Безотказность и ремонтопригодность* ХТС как составляющие комплексного свойства надежности с различных сторон характеризуют способность ХТС в течение определенного времени сохранять свою работоспособность.

*Работоспособность* ХТС – состояние ХТС, при котором она может выполнять заданные функции, сохраняя значения основных параметров в пределах, установленных нормативно-технической документацией. В процессе функционирования под влиянием различных внутренних и внешних факторов ХТС может полностью или частично утрачивать свою работоспособность. Нарушение или утрату работоспособности принято называть *отказом*. Признаки, или критерии, отказа ХТС (элемента) определяются нормативно-технической документацией. Для количественной оценки надежности используют различные *показатели надежности*, которые выбирают с учетом особенностей функционирования ХТС, режимов и условий их эксплуатации, а также с учетом последствий отказов.

*Обеспечение надежности* ХТС – это совокупность научно-методических и организационно-технических мероприятий, направленных на достижение или поддержание заданных показателей надежности ХТС. Высокие экономически оптимальные показатели надежности ХТС можно получить только при достижении оптимальных показателей надежности на стадии проектирования ХТС, при повышении показателей надежности в процессе изготовления оборудования и сооружения ХТС, а также при поддержании оптимальных показателей надежности оборудования в процессе его эксплуатации.

*Безопасность* ХТС – это свойство системы сохранять такое техническое состояние, при котором предотвращается возможность появления отказов, сопровождаемых разгерметизацией оборудования и утечкой токсичных веществ, а также авариями, приводящими к возникновению пожаров, взрывов, к тяжелым последствиям для жизни человека и окружающей среды. Стихийные бедствия (удар молнии, град, наводнение, землетрясение и т. п.) приводят к катастрофическим авариям ХТС, в результате которых безопасность систем резко снижается.

Например, для крупнотоннажных ХТС производства серной кислоты из серы низкие показатели надежности оборудования и технологических схем приводят не только к ежегодному недовыпуску 15% продукции и к росту затрат на ремонт, но и к уменьшению безопасности этих ХТС в результате разгерметизации оборудования и утечки большого количества токсичных

полупродуктов в рабочую зону производственных помещений и в атмосферу.

Снижение безопасности при эксплуатации этих крупнотоннажных ХТС в результате утечек диоксида и триоксида серы приводит к образованию токсичных веществ в приземном слое в предельно-допустимых концентраций. Низкие показатели надежности и безопасности этих действующих крупнотоннажных ХТС обуславливают перерасходы сырья, материалов, энергозатрат на 10% и более по сравнению с проектными значениями. Утечка технологических газов в контактном отделении из отверстия с приведенным диаметром 3 мм в течение года вызывает дополнительную потерю 30 т кислоты или 10 т серы, а также наносит значительный ущерб окружающей среде.

*Чувствительность* ХТС – это свойство систем изменять переменные состояния и величину КЭ их функционирования под влиянием изменений собственных параметров систем (параметров элементов и параметров технологического режима). Создание ХТС, малочувствительных и нечувствительных к изменению их параметров, весьма важно для повышения качества функционирования ХТС.

*Изменения (вариации) параметров* ХТС – это любые их отклонения от значений, принятых за исходные. Различают три основных вида вариаций параметров ХТС:  $\alpha$ -вариации параметров, не изменяющие структуру и начальные условия;  $\beta$ -вариации параметров, изменяющие начальные условия;  $\lambda$ -вариации параметров, изменяющие структуру системы. В дальнейшем рассматривается анализ чувствительности ХТС к  $\alpha$ -вариациям параметров.

Необходимость исследования чувствительности ХТС при их проектировании и эксплуатации обусловлена тем, что при сооружении ХТС значения параметров элементов ХТС, как правило, отличаются от расчетных проектных значений либо вследствие неточности исходных проектных данных, либо вследствие невозможности точной реализации этих параметров в промышленных условиях. Отсюда следует, что информация о чувствительности системы может использоваться для улучшения эффективности ХТС на стадии эксплуатации и, что особенно важно, на стадии проектирования, так как позволяет выявить параметры ХТС, нуждающиеся в наиболее точном определении. Кроме того, зная оценки чувствительности ХТС, можно рассчитать оптимальные значения коэффициентов запаса для параметров элементов, обеспечивающих требуемое значение КЭ.

*Помехозащищенность* ХТС – это свойство систем эффективно функционировать в условиях действия внутренних и внешних помех.

К типичным помехам, или случайным возмущениям, относятся, например, изменение активности катализатора, изменение температуры или давления в элементах и т. д. (внутренние помехи).

хи); изменение атмосферных условий, массового расхода и состава сырья, нарушение режимов поставки сырья и режимов отгрузки готовой продукции и т. д. (внешние помехи).

При эксплуатации ХТС существует взаимосвязь между помехозащищенностью, надежностью и чувствительностью систем. Наличие помех влияет на показатели надежности и чувствительность ХТС, которые в свою очередь изменяют КЭ системы. При решении задач проектирования и эксплуатации ХТС влияние различных показателей свойств (чувствительность, надежность, помехозащищенность) на КЭ системы учитывают последовательно, создавая отдельно математические модели ХТС для анализа чувствительности, надежности и т. п.

*Устойчивость ХТС* – это способность системы сохранять требуемые свойства после малых возмущающих воздействий.

Наличие обратных и противоточных технологических связей в сложных ХТС обуславливает возможность таких явлений в процессе их функционирования, когда после возникновения какого-либо возмущения параметры стационарного режима ХТС не возвращаются к своим прежним значениям при устраниении этого возмущения. Кроме того, при эксплуатации ХТС из-за наличия возмущений может возникнуть такая ситуация, что найденные при проектировании ХТС оптимальные параметры стационарного режима не будут сохраняться после устранения возмущений, и, следовательно, указанный режим нельзя будет реализовать, не используя специальные АСУТП.

Каждому стационарному режиму ХТС соответствует набор определенных значений оценок свойств системы в нормальных условиях, т. е. в отсутствие возмущений. Следует отметить, что нормальные условия функционирования ХТС, строго говоря, являются своеобразной идеализацией. Поскольку в действительности условия функционирования сложных ХТС в той или другой мере отличаются от нормальных, существенно знать, сохраняются ли требуемые свойства системы после возникновения и устранения возмущений.

Чтобы конкретизировать понятие устойчивости ХТС, необходимо определить класс допустимых возмущений (бесконечно малые или конечные, детерминированные или стохастические возмущения), описать рассматриваемое свойство ХТС, а также установить, какой смысл придается словам «сохранение требуемого свойства». Строго говоря, понятие устойчивости относится не к системе как таковой, а к какому-либо свойству ее функционирования. Так, система может быть устойчива к некоторым возмущениям в отношении одного свойства и неустойчива в отношении другого свойства. Точно так же может наблюдаться устойчивость ХТС по отношению к одним возмущениям и неустойчивость по отношению к другим возмущениям в смысле одного свойства.

Рассмотрим устойчивость стационарных режимов ХТС, состоящей из каталитического реактора, в котором протекает экзотермическая реакция, и теплообменника, связанных между собой обратным технологическим потоком по расходу теплоты (рис. 1.15, а). Кривые теплоприхода в реакторе при адиабатических условиях и теплоотвода в теплообменнике ХТС представлены на рис. 1.15, б). Из рис. 1.15, б) следует, что для данной ХТС могут быть три стационарных технологических режима, когда расход тепла равен приходу тепла (точки 1–3). Положение точек стационарных режимов в общем случае зависит от технологических параметров реактора (входная температура, степень превращения, время пребывания) и кинетики химической реакции.

Точки I и 3 (см. рис. 1.15, б) соответствуют устойчивым стационарным режимам ХТС, для которых справедливо условие:

$$(dQ_1/dT)|_{T=T_s} < (dQ_2/dT)|_{T=T_s}, \quad (1.7)$$

где  $T_s$  – температура при стационарном режиме;  $Q_1$  – функция тепловыделения в реакторе;  $Q_2$  – функция теплоотвода в теплообменнике.

Нетрудно видеть, что точке 2 соответствует неустойчивый стационарный режим ХТС.

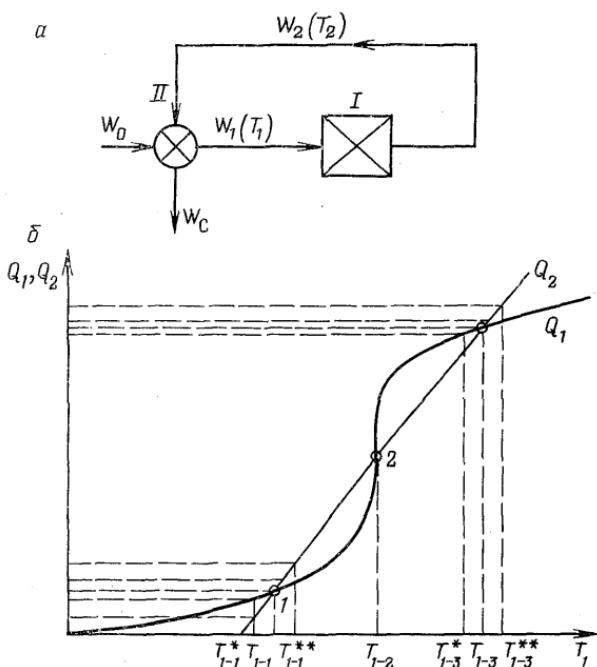


Рис. 1.15. Устойчивость стационарных режимов ХТС:

а – операторная схема; I – оператор химического превращения; II – оператор нагрева; б – кривые теплоприхода и теплоотвода; 1, 2, 3 – точки стационарных технологических режимов системы;  $T_1$  – температура входного (выходного) потока реактора;  $Q_1$  – кривая теплоприхода в реакторе;  $Q_2$  – линия теплоотвода в теплообменнике;  $T_{1-1}^*$ ,  $T_{1-2}$ ,  $T_{1-3}^*$  – температуры потока при стационарных режимах

*Управляемость* ХТС – это свойство систем достигать желаемых целей управления (заданного качества продуктов, заданной производительности и т. д.) при тех ограниченных ресурсах управления, которыми располагает данная система в реальных условиях эксплуатации.

Управляемость является важнейшим свойством динамических режимов функционирования ХТС. Свойство управляемости ХТС непосредственно связано как с выявлением возможности воздействовать на состояние системы, так и с выявлением возможности управляющих переменных изменять вектор состояния ХТС.

Поскольку в реальных условиях допустимые управления процессами функционирования ХТС в некотором смысле ограничены, динамический режим перехода системы из произвольного начального состояния в произвольное конечное состояние не всегда возможен. Совокупность всех конечных состояний, в которые ХТС может перейти при заданном начальном состоянии и заданных ограничениях, называют *множеством достижимых состояний ХТС*, или *достижимым множеством состояний*. Каждая проектируемая ХТС должна быть управляемой. В связи с этим возникает задача совместного проектирования ХТС и АСУТП.

Принципиальным свойством любой ХТС как объекта исследования является свойство эмерджентности. Эмерджентность – это способность системы приобретать новые свойства целостности, которые отличаются от свойств отдельных элементов, образующих эту ХТС. Так, рассмотрим свойство эмерджентности одноконтурной ХТС, операторная схема которой представлена на рис. 1.15, а. Данная ХТС имеет три стационарных режима, один из которых является неустойчивым. Однако каждый из элементов ХТС (реактор и теплообменник) в отдельности имеют только лишь устойчивые стационарные режимы. Кроме того, показатель чувствительности этой одноконтурной ХТС при изменении кпд реактора будет меньше показателя чувствительности одного реактора как локального элемента при изменении его кпд.

В результате взаимодействия между элементами ХТС, которое происходит при помощи технологических связей, изменение параметров входных потоков некоторого элемента (или изменение параметров технологических режимов внутри этого элемента) приводит к изменению параметров выходных потоков других элементов и переменных состояния системы в целом.

Сложность ХТС интуитивно можно оценивать уровнем сложности физико-химических явлений разнообразных ХТП, происходящих в элементах системы; числом элементов; разветвленностью технологических связей между элементами и степенью их взаимодействия; числом параметров состояния ХТС; квалификацией обслуживающего персонала, осуществляющего монтаж, наладку и эксплуатацию ХТС; степенью использования ЭВМ для управления ХТС.

## 1.8. КЛАССИФИКАЦИЯ МОДЕЛЕЙ И ПОНЯТИЕ ИДЕНТИФИКАЦИИ ХТС

Модель реальной ХТС должна всегда представлять собой некоторый компромисс между достаточной простотой некоторого физического или формализованного отображения процессов функционирования исследуемой системы и сложностью существенных особенностей функционирования реальной системы. Модель, полностью отображающую все характеристики и особенности функционирования реальной ХТС, называют изоморфной моделью. Очевидно, что в тех случаях, когда исследуемая реальная ХТС весьма сложна, создание изоморфной модели невозможно. Поэтому сложные ХТС изучают, используя гомоморфные модели, которыми упрощенно отображают наиболее существенные процессы функционирования системы. При исследовании ХТС пользуются гомоморфными моделями двух классов: обобщенными и математическими моделями.

Обобщенные модели ХТС дают общее качественное представление о технологической топологии ХТС, о процессах функционирования элементов (подсистем) и о химическом составе исходного сырья, промежуточных и конечных продуктов ХТС. Обобщенные модели могут быть двух типов: схемно-графические и процедурно-описательные модели.

Схемно-графические модели отображают технологическую топологию исследуемой ХТС в виде некоторого графического изображения (схемы или чертежа). К схемно-графическим моделям ХТС относятся: технологические, структурные, операторные и функциональные схемы (см. разд. 1.3).

Процедурно-описательные модели дают общее упрощенное представление о процессах функционирования ХТС в виде словесного описания технологической топологии ХТС и физико-химической сущности различных ХТП, происходящих в элементах системы. Обобщенные модели ХТС этого типа могут включать в себя спецификацию основного оборудования, сведения о составе необходимого сырья, об основных значениях параметров технологического режима, сведения о фактическом выпуске продукции. Примером процедурно-описательных моделей ХТС являются технологические регламенты и различная текстовая проектно-эксплуатационная документация.

Математические модели ХТС подразделяются на операторно-символические и структурно-топологические. Операторно-символические модели ХТС представляют собой совокупность различных математических соотношений общего вида (1.2), которые определяют значения переменных состояния ХТС как векторную функцию технологической топологии системы, конструкционных и технологических параметров элементов ХТС, а также входных переменных ХТС.

Структурно-топологические модели ХТС представляют собой некоторые специальные графические отображения: либо таких качественных свойств технологической топологии или физико-химической структуры ХТС, по которым можно определить количественные характеристики функционирования системы, либо математических соотношений между переменными и параметрами ХТС, либо логико-информационных связей между уравнениями, параметрами и переменными операторно-символической математической модели ХТС.

Структурно-топологические модели ХТС подразделяют на два класса: блок-схемы ХТС и топологические модели, или графы ХТС. Можно дать наглядно-графическое и теоретико-множественное определение понятия граф. Рассмотрим наглядно-графическое определение. Граф  $G(V, E)$  – это фигура, состоящая из совокупности точек  $V$  и направленных  $U$  или ненаправленных  $U$  произвольных линий  $E$ , соединяющих некоторые из этих точек (рис. 1.16). Точки  $V(v_1, v_2, \dots, v_n)$  называют вершинами, направленные линии  $U = (\bar{u}_1, \bar{u}_2, \dots, \bar{u}_k)$  – дугами, а ненаправленные линии  $U = (u_{k+1}, u_{k+2}, \dots, u_m)$  – ребрами графа  $G(V, U, E)$ . Теоретико-множественное определение понятия граф приведено в разд. 4.2.

Идентификация ХТС – это научно-исследовательская операция разработки оптимальной в определенном смысле математической модели реальной ХТС по экспериментальным данным о ее входных и выходных переменных. Идентификация ХТС предусматривает решение следующих основных задач: выбор класса математических моделей (статические, динамические, детерминированные, вероятностные, непрерывные, дискретные); выбор вида математического отображения (конечные линейные, нелинейные, дифференциальные и другие уравнения); выбор класса и типа входных переменных при идентификационных экспериментах на реальных ХТС; выбор критериев соответствия, или адекватности, математической модели реальной ХТС; выбор типа задачи идентификации (параметрическая и непараметри-

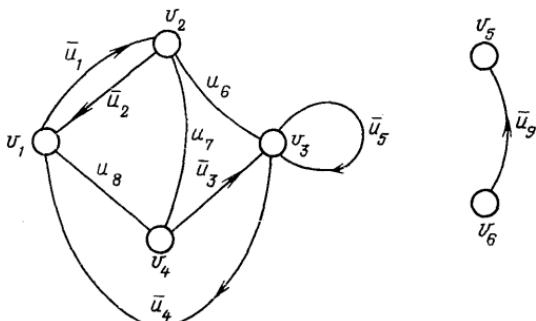


Рис. 1.16. Некоторый граф  $G(V, U, E)$ :

$v_i$  – точки, или вершины ( $i = 1, 6$ );  
 $U_1, U_5, U_9$  – направленные линии, или дуги;  $U_6-U_8$  – ненаправленные линии, или ребра

ческая, или функциональная, идентификация) и разработка соответствующего алгоритма оптимального решения задачи идентификации.

Задача идентификации ХТС в общем виде может быть сформулирована следующим образом. На основе совокупности сигналов входных  $\bar{X}^u(\tau)$  и выходных переменных  $\bar{Y}^u(\tau)$ , полученных при идентификационных экспериментах для реальной ХТС, описываемой математическим соотношением (1.2), необходимо указать оператор  $\bar{F}^M[*]$  из заданного класса математических операторов, который наилучшим в определенном смысле образом представлял бы (аппроксимировал) истинный оператор  $\bar{F}[*]$  на заданной совокупности сигналов  $\bar{X}(\tau)$  и  $\bar{Y}(\tau)$ , охватывающих, строго говоря, все возможные режимы функционирования реальной ХТС. Математическая модель идентифицируемого объекта имеет вид:

$$\bar{Y}^M(\tau) = \bar{F}^M[\bar{X}^M(\tau), \bar{A}^M], \quad (1.8)$$

где  $\bar{X}^M(\tau)$  – вектор входных переменных модели;  $\bar{Y}^M(\tau)$  – вектор выходных переменных модели;  $\bar{F}^M[*]$  – аппроксимирующий математический оператор;  $\bar{A}^M$  – вектор параметров модели реальной ХТС;  $\tau$  – время.

Наилучшей аппроксимацией истинного оператора  $\bar{F}[*]$  оператором  $\bar{F}^M[*]$  считается такая аппроксимация, для которой функционал разности

$$\delta_{\text{нд}}(\tau) = \bar{Y}(\tau) - \bar{Y}^M(\tau) = \bar{F}[\bar{X}(\tau), \bar{A}] - \bar{F}^M[\bar{X}^M(\tau), \bar{A}^M], \quad (1.9)$$

вычисленный для совокупности сигналов  $\bar{X}(\tau)$  и  $\bar{Y}(\tau)$ , охватывающей все возможные режимы функционирования реальной ХТС при заданных начальных условиях, принимает экстремальное значение.

Задача параметрической идентификации ХТС формулируется следующим образом: известен вид математического оператора  $\bar{F}^M$ , образующего формальную запись математической модели ХТС (1.8), на основе экспериментальных данных о значениях входных и выходных переменных  $\bar{X}^u(\tau)$  и  $\bar{Y}^u(\tau)$ , вектора параметров  $\bar{A}^M$ , при которых математический оператор  $\bar{F}^M[*]$  наилучшим (или достаточно точным) в определенном смысле образом аппроксимирует истинный оператор  $\bar{F}[*]$  реальной ХТС (1.2) на некотором интервале значений входных и выходных переменных реальной ХТС.

Задача непараметрической идентификации ХТС состоит в выборе вида аппроксимирующего оператора  $\bar{F}^M[*]$ , образующего формальную запись математической модели (1.8), который наилучшим в определенном смысле образом описывает функционирование реальной ХТС (1.2) на некотором интервале значений входных и выходных переменных реальной системы. В дальнейшем будем рассматривать методы решения задач параметрической идентификации ХТС.

Выделяют два класса методов параметрической идентификации: прямые и аддитивные методы. Сущность аддитивных

методов идентификации объектов состоит в использовании цифровой адаптивной модели реального объекта, параметры которой настраиваются на минимум разности (невязки) выходных сигналов реального объекта и цифровой модели, на входы которых поступает один и тот же входной сигнал. В методах идентификации с адаптивной моделью объекта могут использоваться беспоисковые и поисковые алгоритмы настройки параметров цифровой модели.

Прямыми методами параметрической идентификации называют также методы, в которых неизвестные параметры дискретной во времени модели определяются с использованием одного из алгоритмов численного решения системы уравнений, получающихся подстановкой в математический оператор модели последовательностей значений входных и выходных переменных реального объекта, измеренных в дискретные моменты времени. Искомые параметры модели считаются постоянными на протяжении интервала идентификации  $\tau_{ид}$ , к которому относятся измеренные значения  $\bar{X}$  и  $\bar{Y}$ . Таким образом, при прямых методах идентификация XTC осуществляется в классе моделей

$$\bar{Y}^m[k] = \bar{F}^m[\bar{X}^m[k], k, \bar{A}^m], \quad (1.10)$$

где  $k$  – дискретный момент времени.

Выделяют два класса алгоритмов оптимального решения задач идентификации: алгоритмы оптимальной по быстродействию и алгоритмы оптимальной по точности идентификации. Алгоритмы оптимальной по быстродействию идентификации обеспечивают минимум времени  $\tau_{ид}$  обработки экспериментальных данных при заданной точности идентификации (1.9). Алгоритмы оптимальной по точности идентификации обеспечивают минимальную ошибку идентификации (1.9) при заданных ограничениях на время идентификации  $\tau_{ид} \leq \tau^*$ .

## 1.9. ОСНОВНЫЕ СВЕДЕНИЯ О ПРОЕКТИРОВАНИИ И ЭКСПЛУАТАЦИИ XTC

Проектирование и эксплуатация XTC представляют собой, с одной стороны, два этапа «жизненного цикла», или «цикла существования», XTC, а с другой стороны, это две важнейшие области инженерно-технической деятельности. Реализация новейших достижений научно-технического прогресса в промышленности становится возможной при использовании проектирования.

Проектирование XTC – это создание в установленные сроки комплекса технической документации, необходимой для сооружения XTC производства желаемой химической продукции определенного качества с оптимальным ТЭП при соблюдении санитарно-гигиенических условий труда и требований охраны окружаю-

щей среды. Проектирование представляет собой творческую, сложную, многообразную и трудоемкую операцию поиска оптимальных инженерно-технических решений в условиях неполной информации и состоит из нескольких организационных и инженерно-технических стадий. Новые ХТС проектируют на основе решений, принятых в утвержденных технико-экономических обоснованиях (ТЭО), в две организационные стадии: 1) проект; 2) рабочая документация (рабочий проект). Тиражируемые типовые ХТС для новых районов строительства проектируют, как правило, в одну стадию – рабочий проект.

В проекте подробно разрабатываются основные технические решения, принятые в техническом задании (ТЗ), в ТЭО и в технологическом регламенте (ТР), определяются ТЭП создаваемой ХТС и ее сметная стоимость. В результате создания проекта ХТС разрабатывается технологическая схема ХТС, выбираются и рассчитываются все виды элементов ХТС, т. е. оборудования, составляются калькуляция себестоимости готовой продукции и сметы на строительство проектируемой ХТС, разрабатываются проекты вспомогательных сооружений.

В рабочем проекте ХТС определяются окончательные формы и размеры оборудования; осуществляется объемно-планировочное решение (компоновка) ХТС; разрабатываются вся технологическая документация, чертежи и (или) макеты, по которым непосредственно ведутся изготовление оборудования, монтаж и строительство ХТС. Рабочий проект создается на основе проекта, утвержденного заказчиком.

Эксплуатация ХТС – это использование по назначению данной ХТС для производства желаемой химической продукции требуемого качества с оптимальными ТЭП. Основными задачами эксплуатации ХТС являются: интенсификация ХТП, реконструкция производства, организация технического обслуживания и ремонтов технологического оборудования и АСУТП для обеспечения надежности и безопасности ХТС, сокращение безвозвратных потерь всех видов сырья и ТЭР.

Реконструкция ХТС – это переоборудование и переустройство производства, включающие замену морально устаревшего и физически изношенного оборудования, увеличение объема выпуска и повышение качества продукции на основе использования высокоеффективных ХТП, изменение структуры технологических связей между аппаратами без строительства новых и без расширения существующих производственных площадей.

Для решения указанных задач эксплуатации и реконструкции ХТС необходимо исследовать процессы функционирования действующей ХТС, в частности характеристики и особенности взаимодействия элементов, чтобы предсказать изменения параметров технологических режимов элементов и значений КЭ функционирования ХТС, а также выявить резервы сокращения

потерь сырья и ТЭР; необходимо определять параметры технологических режимов и параметры входных и промежуточных ТП, изменения которых позволяют оптимизировать величину КЭ системы с учетом имеющихся технико-экономических ресурсов и условий охраны окружающей среды.

### 1.10 ПОНЯТИЯ АНАЛИЗА, ОПТИМИЗАЦИИ И СИНТЕЗА ХТС

При поиске научно обоснованных решений разнообразных задач эксплуатации, реконструкции и проектирования ХТС возникают три вида научно-исследовательских операций: анализ, оптимизация и синтез ХТС.

Анализ ХТС – это операция определения для данной ХТС при заданных технологической топологии, конструкционных и технологических параметрах каждого элемента системы, а также при известных входных переменных ХТС значений промежуточных и выходных переменных, показателей свойств и КЭ функционирования ХТС.

Оптимизация ХТС – это операция определения для данной ХТС при заданных технологической топологии, типоконструкциях каждого элемента, при известных входных переменных и при ограничениях на значения параметров технологических режимов каждого элемента таких значений параметров технологических режимов, а также конструкционных и технологических параметров элементов, которые обеспечивают оптимальное значение КЭ функционирования ХТС.

Основная цель анализа ХТС состоит в том, чтобы математически связать характеристики состояния системы с параметрами и характеристиками состояния отдельных элементов (подсистем) в зависимости от структуры технологических связей между элементами (подсистемами) ХТС. На практике при решении задач проектирования сложных ХТС, реконструкции и оптимизации технологических режимов действующих ХТС задачи анализа наиболее часто трактуются как задачи оценки эффективности возможных альтернативных вариантов системы. Для каждого из альтернативных вариантов ХТС необходимо с использованием математической модели системы вычислить совокупность показателей свойств и КЭ системы. Сопоставляя значения этих показателей свойств и критериев эффективности ХТС, можно получить представление о недостатках и преимуществах каждого из вариантов системы.

Необходимо заметить, что при выборе наилучшего, или оптимального варианта, ХТС нужно обращать внимание не только на то, чтобы показатели свойств системы имели оптимальные значения, но также и на стабильность значений этих показателей при изменении в определенных пределах самих параметров системы, т. е. всегда учитывать показатели чувствительности ХТС. Значение показателей чувствительности ХТС

часто оказывается решающим при окончательной оценке качества функционирования рассматриваемого варианта системы.

Синтез ХТС – это операция создания ХТС для производства заданной химической продукции с учетом определенных требований к функционированию ХТС, а также различных физико-химических и технологических ограничений на их выполнение. Эта операция включает выбор химического способа производства целевых продуктов, разработку технологической топологии системы (выбор видов ХТП, типо-конструкций каждого элемента, выбор структуры и определение покомпонентного состава технологических связей между элементами), определение конструкционных и технологических параметров каждого элемента, обеспечивающих функционирование ХТС при оптимальной величине КЭ и оптимальных показателях свойств ХТС.

Рассмотрим особенности процедур поиска решений задач анализа, оптимизации и синтеза ХТС. Процедуры поиска решений задач анализа ХТС – это совокупность различных формализованных вычислительных процедур, которые могут автоматизированно выполняться ЭВМ по определенному алгоритму без участия человека. Процедуры поиска решений задач оптимизации ХТС представляют собой многократно повторяемые процедуры анализа ХТС при различных допустимых значениях управляющих, или оптимизирующих, переменных ХТС.

Принципиальная особенность поиска решений неформализуемых задач синтеза ХТС состоит в сочетании как творческих интеллектуальных процедур, так и обычных вычислительных процедур. Творческими интеллектуальными процедурами, которые не поддаются полной формализации и алгоритмизации, при поиске решений задач синтеза оптимальных и ресурсосберегающих ХТС являются, например, процедуры выбора химического способа производства продуктов, выбора типов ХТП и типо-конструкций аппаратов, создания структуры технологических связей между аппаратами. Указанные творческие интеллектуальные процедуры могут осуществляться только лицом, принимающим решения (ЛПР), в режиме интеллектуального диалога с ЭВМ (см. разд. 9.1). Интеллектуальный диалог ЛПР с ЭВМ, который должен проводиться на ограниченном естественном языке (*ОЕЯ*), позволяет в наиболее полной мере эффективно использовать как творческие способности мышления ЛПР, так и вычислительные возможности ЭВМ при поиске решений неформализуемых задач синтеза ХТС.

## 1.11. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

**Вопрос 1-1 (В1-1).** Что такое технологическая структура, или технологическая топология, ХТС?

В1-2. Что такое состояние ХТС?

В1-3. Какой вид имеет общее формальное выражение математической модели ХТС?

В1-4. От чего зависят значения критериев эффективности ХТС?

В1-5. Какие можно выделить иерархические уровни управления сложной ХТС?

В1-6. Чем различаются основные и вспомогательные технологические операторы ХТС?

В1-7. В чем состоит отличие технологической от операторной схем ХТС?

В1-8. Каким технологическим блокам производства соответствуют однородные ХТС?

В1-9. Чем различаются односторонние и встречнонаправленные, или контурные, ХТС?

В1-10. Чем различаются упорядоченные и взаимосвязанные многоконтурные ХТС?

В1-11. В чем отличие способов функционирования непрерывно-циклических от периодических ХТС?

В1-12. Назовите основные предпосылки для создания гибких ХТС.

В1-13. В чем различие безотходных и ресурсоберегающих ХТС?

В1-14. Какие типы технологических процессов и технологических связей между элементами характерны для ХТС?

В1-15. Назовите виды обобщенных экономических критериев эффективности ХТС и запишите формулы для их расчета.

В1-16. Какова взаимосвязь между свойствами надежности и безопасности ХТС?

В1-17. Чем различаются свойства помехозащищенности и надежности ХТС?

В1-18. Поясните сущность свойств эмерджентности и сложности ХТС.

В1-19. Назовите типы обобщенных моделей ХТС.

В1-20. В чем различие схемно-графических и структурно-топологических моделей ХТС?

В1-21. Назовите виды операторно-символических моделей ХТС.

В1-22. Назовите основные задачи идентификации ХТС.

В1-23. Запишите математическую формулировку задачи параметрической идентификации ХТС.

В1-24. В чем отличие задач параметрической от непараметрической идентификации ХТС?

В1-25. Назовите основные задачи проектирования и реконструкции ХТС.

В1-26. Какие основные задачи решают химики-технологи при проектировании и эксплуатации ХТС?

В1-27. В чем состоит отличие операций оптимизации от анализа ХТС?

В1-28. Назовите основные неформализуемые, или интеллектуальные творческие, операции при синтезе оптимальных ресурсоберегающих ХТС.

В1-29. Каким образом можно практически реализовать выполнение интеллектуальных творческих операций синтеза ХТС на ЭВМ?

В1-30. Изменения значений каких переменных и параметров ХТС влияют на величину КЭ оптимизации ХТС на стадии проектирования?

В1-31. Изменения значений каких переменных и параметров ХТС влияют на величину КЭ при оптимизации действующих ХТС?

В1-32. Какие общие научно-исследовательские задачи возникают при эксплуатации и реконструкции ХТС?

**Задание 1-1** (31-1). Составьте функциональную схему ХТС производства капролактама из бензола.

31-2. Составьте операторную схему отделения химического синтеза карбамида в ХТС производства карбамида по схеме с полным жидкостным рециркулом.

31-3. Составьте упрощенные и усложненные операторные схемы процессов конденсации и компрессии, фильтрации и кристаллизации.

31-4. Составьте структурную и операторную схему производства серной кислоты из серы.

# ПРИНЦИПЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И АНАЛИЗА ХТС

## 2.1. ОПЕРАТОРНО-СИМВОЛИЧЕСКАЯ МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ХТС

Рассмотрим общий вид операторно-символической модели ХТС (1.2), которую в дальнейшем будем просто называть математической моделью (ММ). Математическая модель ХТС состоит из трех частей: 1) совокупности ММ отдельных элементов; 2) системы уравнений структуры технологических связей ХТС; 3) системы уравнений ограничений на значения некоторых параметров и переменных элементов ХТС.

Математическая модель каждого  $k$ -го элемента ХТС может быть записана в следующем виде:

$$\bar{Y}^{(k)} = \bar{F}^{(k)}(\bar{X}^{(k)}, \bar{U}^{(k)}); \quad k = \overline{1, N}, \quad (2.1)$$

где  $\bar{Y}^{(k)} = (y_1^{(k)}, \dots, y_m^{(k)})$ ;  $\bar{X}^{(k)} = (x_1^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$ ;  $\bar{U}^{(k)} = (u_1^{(k)}, \dots, u_r^{(k)})$ ;  $n(m)$  – размерность вектора входных  $\bar{X}$  (выходных  $\bar{Y}$ ) переменных;  $r$  – размерность вектора управляемых переменных  $\bar{U}$ ;  $N$  – число элементов ХТС.

Векторы переменных  $\bar{Y}^{(k)}$  и  $\bar{X}^{(k)}$  соответствуют векторам параметров выходных и входных технологических потоков  $k$ -го элемента, а вектор управляемых переменных, или управлений,  $\bar{U}^{(k)}$  включает конструкционные и технологические параметры элемента ХТС, изменяя которые, можно влиять на функционирование  $k$ -го элемента.

В выражении (2.1) в общем случае явный аналитический вид вектор-функции  $\bar{F}^{(k)}$  может быть не известен, но предполагают, что всегда существует алгоритм, который позволяет по известным значениям векторов входных и управляемых переменных вычислить значения вектора выходных переменных  $k$ -го элемента. Например, для определения вектора выходных переменных реактора с неподвижным слоем катализатора, который является элементом ХТС, необходимо разработать алгоритм решения задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений, а в случае учета продольной диффузии – алгоритм решения краевой задачи. Для определения выходных переменных элемента ХТС, которым является реактор идеального смешения или любой аппарат ХТС с противотоком (например, экстрактор, абсорбер и т. д.), необходимо разработать алгоритм решения системы нелинейных алгебраических уравнений и т. д.

Рассмотрим общий вид системы уравнений структуры технологических связей ХТС. Переменные, соответствующие параметрам входных, выходных и промежуточных технологических по-

токов ХТС, в дальнейшем будем называть соответственно входными, выходными и промежуточными переменными ХТС.

Далее предположим, что для каждого  $k$ -го элемента первые  $s$  ( $s \leq n$ ) входных переменных являются входными переменными ХТС, а первые  $g$  ( $g \leq m$ ) выходных переменных – выходными переменными системы. Заметим, что для большинства элементов  $s = g = 0$ . Вектор с координатами в виде входных переменных элемента, являющихся входными переменными ХТС, обозначают через  $\bar{X}^{(k)} = (x_1^{(k)}, \dots, x_s^{(k)})$ .

Для описания структуры технологических связей ХТС используют два вида уравнений. В первом случае структура технологических связей ХТС, когда выходной технологический поток  $p$ -го элемента является входным ТП для  $k$ -го элемента (рис. 2.1, *a*), описывается системой уравнений вида:

$$x_i^{(k)} - y_q^{(p)} = 0; \quad i = (s+1), \dots, n; \quad k = \overline{1, N}; \quad k \neq p, \quad (2.2)$$

где  $y_q^{(p)}$  –  $q$ -я выходная переменная  $p$ -го элемента;  $x_i^{(k)}$  –  $i$ -я входная переменная  $k$ -го элемента.

Уравнения (2.2) предполагают, что в разных ТП число химических компонентов различно, и характеризуют связи всех входных и выходных переменных элементов ХТС.

Рассмотрим другой вид системы уравнений структуры технологических связей ХТС. Пусть  $k$ -й элемент имеет  $P$  входных и  $M$  выходных потоков. Обозначим для  $k$ -го элемента  $\bar{X}^{(ks)} = (x_1^{(ks)}, \dots, x_n^{(ks)})$  – вектор переменных  $s$ -го входного потока;  $\bar{Y}^{(kj)} = (y_1^{(kj)}, \dots, y_m^{(kj)})$  – вектор переменных  $j$ -го выходного потока. Математическая модель  $k$ -го элемента может быть записана

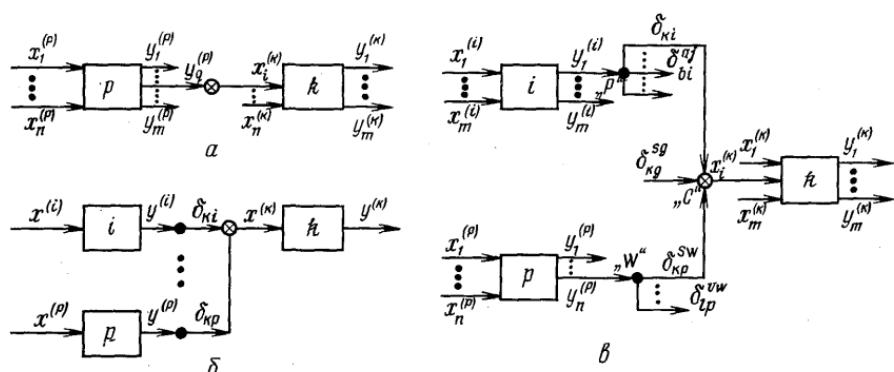


Рис. 2.1. Пояснение к математическому описанию различных видов технологических связей между элементами ХТС:

*a* – простая структура технологических связей между  $p$ -ым и  $k$ -ым элементами ХТС; *b* – структура технологических связей между  $i$ -ым,  $p$ -ым и  $k$ -ым элементами ХТС, имеющими по одному выходному потоку (коэффициент структурного разделения потоков  $\delta_{ki} = \delta_{xp} = 1$ ); *c* – произвольная структура технологических связей между  $i$ -ым,  $p$ -ым и  $k$ -ым элементами ХТС ( $0 \leq \delta_{ki} \leq 1$ ); «*C*» – точка смещения, «*P*», «*И*» – точки разделения для технологического потока

следующим образом:

$$\bar{Y}^{(kj)} = \bar{F}^{(kj)}(\bar{X}^{(k1)}, \dots, \bar{X}^{(kp)}), \quad j = \overline{1, M}. \quad (2.3)$$

Далее предполагаем, что все технологические потоки, отображаемые векторами  $\bar{X}^{(ki)}$  и  $\bar{Y}^{(kj)}$ , имеют одинаковое число химических компонентов (если в некотором ТП отсутствуют определенные компоненты, то концентрации этих компонентов формально можно считать равными нулю). Отсюда соотношения для технологических связей между элементами могут быть записаны в виде:

$$x^{(ks)} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^p \delta_{ki}^{(sj)} y^{(ij)}, \quad (2.4)$$

где параметры  $\delta_{ki}^{(sj)}$ , которые называют коэффициентами структурного разделения потоков (ксрп), равны:

$$\delta_{ki}^{(sj)} = \begin{cases} 1, & \text{если } j\text{-ый выходной поток } i\text{-го элемента поступает на } s\text{-й вход } k\text{-го} \\ & \text{элемента;} \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases}$$

Если  $i$ -й элемент имеет один выходной поток, а  $k$ -й элемент – один входной поток, пользуются более простым обозначением для ксрп:

$$\delta_{ki}^{11} = \delta_{ki}. \quad (2.5)$$

Если каждый элемент ХТС имеет один входной и один выходной поток (рис. 2.1, б), то соотношение (2.4) с учетом обозначений (2.5) примет вид:

$$x^{(k)} = \sum_{i=1}^N \delta_{kj} y^{(i)}. \quad (2.6)$$

Если в структуре ХТС предполагается, что выходной поток любого элемента ХТС может поступать только на один вход другого элемента (например, если  $\delta_{lm}^{pq} = 1$ , то  $\delta_{km}^{sq} = 0$  для всех  $k \neq l, s \neq p$ ), то это условие можно выразить уравнением:

$$a^{qm} = \sum_s \delta_{km}^{sq} - 1 = 0; \quad m = \overline{1, N}, \quad q = \overline{1, M}. \quad (2.7)$$

При наличии в ХТС байпасных, параллельных и обратных ТП в структуре технологических связей появляются точкистыковки ТП, которые отображаются с использованием следующих уравнений (рис. 2.1, в):

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^p \delta_{ki}^{(sj)} = 1; \quad (2.8)$$

$$0 \leq \delta_{ki}^{(sj)} \leq 1; \quad (2.9)$$

описание «точки смешения» для  $s$ -го входного потока  $k$ -го элемента  $x^{(ks)}$ :

$$x_i^{(k)} = \delta_{ki}^{(sj)} y_1^{(i)} + \delta_{kj}^{(sq)} y_l^{(q)} + \delta_{kp}^{(sw)} y_n^{(p)}. \quad (2.10)$$

Рассмотрим общий вид системы уравнений ограничений для вектора управлений каждого элемента XTC:

$$\bar{\varphi}_i^{(k)}(\bar{U}^{(k)}) \leq \bar{A}^{(k)}, \quad i = \overline{1, p}. \quad (2.11)$$

В большинстве случаев ограничения имеют вид простых неравенств:

$$\bar{c}^{(k)} \leq \bar{U}^{(k)} \leq \bar{b}^{(k)}, \quad (2.12)$$

где  $\bar{c}^{(k)}$ ,  $\bar{b}^{(k)}$  – некоторые заданные векторы размерности  $r$ .

Обычно при исследовании XTC накладывают также ограничения на выходные переменные XTC. Для простоты записи считают, что первые  $\tilde{g}$  ( $\tilde{g} \leq g^*$ ) выходных переменных  $k$ -го элемента всегда заданы:

$$y_i^{(k)} = a_i^{(k)}, \quad i = \overline{1, \tilde{g}}, \quad k = \overline{1, N}. \quad (2.13)$$

Более сложные ограничения на выходные переменные XTC нетрудно преобразовать в ограничениях типа (2.13).

Для простоты изложения переменные  $y_i^{(k)}$  ( $i = 1, \tilde{g}$ ) будем иногда называть закрепленными выходными переменными  $k$ -го элемента, а переменные  $y_i^{(k)}$  [для  $k = (\tilde{g} + 1), \dots, g$ ] – произвольными выходными переменными  $k$ -го элемента XTC. Иногда имеются также ограничения на промежуточные переменные XTC:

$$\bar{\varphi}_x(\bar{X}^{(k)}) \leq 0; \quad (2.14)$$

$$\bar{\varphi}_y(\bar{Y}^{(k)}) \leq 0. \quad (2.15)$$

В дальнейшем, если нет дополнительных указаний, будем предполагать, что все входные переменные XTC  $x_i^{(k)}$  (для  $i = 1, s$ ;  $k = 1, N$ ) являются произвольными переменными, подлежащими определению при решении задач анализа или оптимизации XTC. Эти произвольные входные переменные формально не отличаются от управляющих переменных, поэтому те и другие иногда будем считать управлением, вводя при этом новые обозначения:

$$x_i^{(k)} = u_{r+i}^{(k)}, \quad i = \overline{1, s}, \quad k = \overline{1, N}. \quad (2.16)$$

Если обозначить  $\tilde{r} = r + s$ , то вектор управлений  $U^{(k)}$  будет иметь размерность  $\tilde{r}$ .

Критерий эффективности XTC вида (1.3) обычно является аддитивно-сепарабельной функцией произвольных входных и выходных переменных, а также управляющих переменных каждого элемента XTC; эта функция в общем случае имеет следую-

щее выражение:

$$\Psi = \sum_{k=1}^N \psi^{(k)}(\bar{U}^{(k)}, \bar{Y}^{(k)}), \quad (2.17)$$

где  $\bar{Y}^{(k)} = (\bar{y}_{g+1}, \dots, y_g)$  – вектор произвольных выходных переменных;  $\psi^{(k)}$  – КЭ отдельного  $k$ -го элемента;  $N$  – число элементов ХТС.

Для ХТС, структурная схема которой изображена на рис. 2.2, необходимо составить ММ. Операторно-символическая ММ данной ХТС имеет следующий вид:

математические модели элементов I–VI:

$$\begin{aligned} y_{1-1} &= f_{1-1}(x_{1-1}, x_{1-2}, K_1); & y_{4-1} &= f_{4-1}(x_{4-1}, x_{4-2}, K_4); \\ y_{2-1} &= f_{2-1}(x_{2-1}, K_2); & y_{4-2} &= f_{4-2}(x_{4-1}, x_{4-2}, K_4); \\ y_{2-2} &= f_{2-2}(x_{2-1}, K_2); & y_{5-1} &= f_{5-1}(x_{5-1}, K_5); \\ y_{3-1} &= f_{3-1}(x_{3-1}, x_{3-2}, K_3); & y_{5-2} &= f_{5-2}(x_{5-1}, K_5); \\ y_{6-1} &= f_{6-1}(x_{6-1}, K_6), \end{aligned} \quad (2.18)$$

где  $y_{i-k}(x_{i-k})$  –  $k$ -выходной (входной) поток  $i$ -го элемента ХТС;  $f_{i-k}$  – функция;  $K_i$  – параметры  $i$ -го элемента.

Система уравнений структуры технологических связей:

$$\begin{aligned} y_{1-1} - x_{2-1} &= 0; & y_{3-1} - x_{4-1} &= 0; & y_{7-1} &= (1 - \delta)x_{7-1}; & y_{6-1} - x_{8-2} &= 0; \\ y_{2-1} - x_{3-1} &= 0; & y_{4-2} - x_{7-1} &= 0; & y_{7-1} - x_{6-1} &= 0; & y_{5-1} - x_{8-1} &= 0; \\ y_{2-2} - x_{3-2} &= 0; & y_{7-2} &= \delta x_{7-1}; & y_{7-2} - x_{5-1} &= 0; & y_{8-1} &= x_{8-1} + x_{8-2}; \\ 0 < \delta < 1 & & & & & & y_{8-1} - x_{1-2} &= 0. \end{aligned}$$

ограничения в виде неравенств:

$$a_4^{**} < x_{4-2} < a_4^*; \quad 0 < y_{5-2} \leq a_5^*; \quad 0 < K_2 \leq K_2^*; \quad K_6^{**} < K_6 < K_6^*;$$

выражение для КЭ системы:

$$\begin{aligned} \Psi &= \psi^{(1)}(x_{1-1}, x_{1-2}, K_1) + \psi^{(2)}(x_{2-1}, K_2) + \psi^{(3)}(x_{3-1}, x_{3-2}, K_3) + \\ &+ \psi^{(4)}(x_{4-1}, x_{4-2}, K_4) + \psi^{(5)}(x_{5-1}, K_5) + \psi^{(6)}(x_{6-1}, K_6). \end{aligned}$$

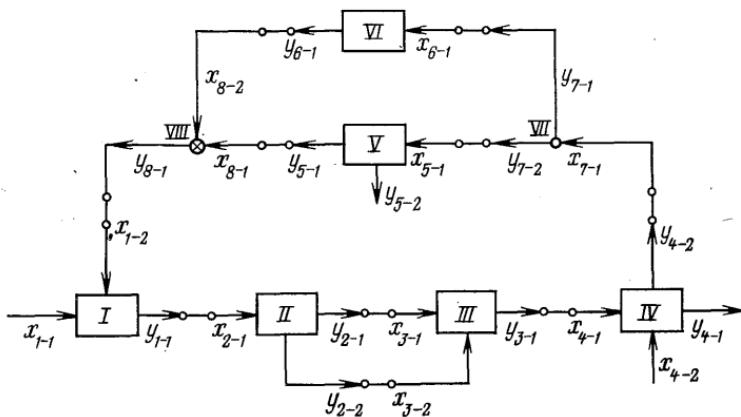


Рис. 2.2. Структурная схема некоторой ХТС

Операторно-символические ММ каждого элемента ХТС могут быть получены: аналитически с использованием основных законов, отражающих сущность физико-химических явлений; экспериментально на основе обработки результатов измерений входных и выходных переменных реальных ХТП; экспериментально-аналитически путем уточнения значений параметров созданной аналитической модели ХТП по результатам вычислительных экспериментов.

## 2.2. ПРЯМЫЕ МЕТОДЫ ИДЕНТИФИКАЦИИ СТАТИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ ХТС

Прямые методы идентификации статических режимов ХТС позволяют получать детерминированные статические математические модели ХТС с дискретным временем типа (1.13). Необходимо отметить, что математический оператор  $\bar{F}^M$  в выражении (1.13) может быть оператором с памятью как в отношении  $x^M$ , так и в отношении  $y^M$ . Он может быть эквивалентен векторному разностному нелинейному уравнению вида:

$$\bar{F}_{\text{вых}}^M [Y^M[k], \dots, Y^M[k-d], \bar{A}, k] = \bar{F}_{\text{вх}}^M [\bar{X}^M[k], \dots, \bar{X}^M[k-r], \bar{A}, k], \quad (2.19)$$

где  $\bar{F}_{\text{вых}}^M$ ,  $\bar{F}_{\text{вх}}^M$  – векторные функции указанных векторных аргументов;  $d, r$  – целые положительные числа.

Выражение (2.19) представляет собой достаточно общее описание разностной детерминированной модели идентифицируемого объекта. Согласно определению метода прямой идентификации, величины  $\bar{X}^M$ ,  $\bar{Y}^M$  заменяются измеренными входной и выходной величинами объекта.

Предполагая, что эти величины измеряются аддитивными шумами для входной переменной  $\bar{\xi}$ , для выходной  $\bar{\eta}$  вместо (2.19) записываем:

$$\begin{aligned} & \bar{F}_{\text{вых}}^M [Y[k] + \bar{\eta}[k], \dots, \bar{Y}[k-d] + \bar{\eta}[k-d], \bar{A}, k] = \\ & = F_{\text{вх}}^M [\bar{X}[k] + \bar{\xi}[k], \dots, \bar{X}[k-r] + \bar{\xi}[k-r], \bar{A}, k]. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Задача прямой идентификации в классе моделей (2.20) формулируется следующим образом: получив в идентификационном эксперименте последовательности значений  $\bar{X}[k]$ ,  $\bar{Y}[k]$  ( $k = k_1, k_2, \dots, k_r$ ), зная вид функций  $\bar{F}_{\text{вх}}^M$ ,  $\bar{F}_{\text{вых}}^M$  и зная (или не зная) статистические характеристики шумов измерения  $\bar{\xi}[k]$ ,  $\bar{\eta}[k]$ , решить (приближенно) систему уравнений (2.20) относительно  $\bar{A}$ , получив таким путем оценку вектора параметров  $\bar{A}$ .

Заметим, что вектор-функции  $\bar{F}_{\text{вх}}^M$ ,  $\bar{F}_{\text{вых}}^M$  в векторном разностном уравнении (2.20) суть вектор-столбцы, причем каждое из соответствующих скалярных уравнений

$$\begin{aligned} & F_{\text{вых}, i}^M [y[k] + \eta[k], \dots, y[k-d] + \eta[k-d], a_{(i)}, k] = \\ & = F_{\text{вх}, i}^M [x[k] + \xi[k], \dots, x[k-r] + \xi[k-r], a_{(i)}, k] \end{aligned} \quad (2.21)$$

обычно содержит автономную группу параметров  $a_{(i)}$  [подвектор параметров, не фигурирующих ни в одном из скалярных уравнений (2.21) с индексом, отличным от  $i$ ]. При этом задача идентификации распадается на независимые задачи, в каждой из которых рассматривается только скалярное разностное уравнение вида (2.21).

Пусть ММ, в классе которой осуществляется идентификация некоторого безынерционного (не имеющего памяти) реального объекта, имеет вид модели с линейными параметрами:

$$y^m[k] = \hat{\bar{A}}^t \Phi[\bar{X}^m[k], k], \quad (2.22)$$

где  $\hat{\bar{A}} = \bar{A}^m$  – вектор неизвестных постоянных параметров,  $y^m[k]$  – скалярный выходной сигнал модели;  $\bar{X}^m[k]$  – векторный входной сигнал модели;  $\Phi[\bar{X}^m[k], k]$  – векторная известная базисная функция;  $t$  – символ транспонированной матрицы.

В скалярной форме

$$y^m[k] = \sum_{v=1}^N \hat{a}_v \phi_v[\bar{X}^m[k], k]. \quad (2.23)$$

Рассмотрим сущность прямого метода идентификации. Пусть в идентификационном эксперименте осуществляется  $N$  измерений  $x$  и  $y$ , например, в моменты времени  $k = \overline{1, N}$ . Подставляя вместо  $x^m[k]$ ,  $y^m[k]$  значения, полученные в идентификационных экспериментах, записываем уравнение в матричной форме

$$\bar{Y}[N] = [\Phi] \times \hat{\bar{A}} \quad (2.24)$$

где  $\bar{Y}[N]$  – вектор-столбец, составленный из  $N$  скаляров;  $\bar{Y}[N] = [y[1], \dots, y[N]]^t$ ;  $[\Phi]$  – матрица вида:

$$[\Phi] = \begin{bmatrix} \varphi_1[x[1], 1] & \dots & \varphi_N[x[1], 1] \\ \dots & \dots & \dots \\ \varphi_1[x[N], N] & \dots & \varphi_N[x[N], N] \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

Если матрица  $[\Phi]$  невырожденная, то, согласно (2.24),

$$\hat{\bar{A}} = [\Phi]^{-1} \times \bar{X}[N]. \quad (2.26)$$

Однако практически алгоритм прямой идентификации (2.26) обычно оказывается нереализуемым. Это связано с часто встречающейся плохой обусловленностью (близостью к вырождению) матрицы  $[\Phi]$ , наличием случайных ошибок измерений. Поэтому для определения оценок коэффициентов  $\hat{\bar{A}}$  в уравнении (2.22) по экспериментальным данным применяют специальные методы статистической обработки, которые отличаются требованиями,

предъявляемыми к свойствам оценки коэффициентов  $\hat{A}$ ; метод наименьших квадратов (МНК), метод максимума правдоподобия (ММП), метод минимального поиска (ММНП) и др.

Идентификационный эксперимент может быть *пассивным* и *активным*. Рассмотрим вначале методы идентификации при пассивных экспериментах: методы сумм произведений и наименьших квадратов.

**Метод сумм произведений.** Предполагается, что имеется  $N$  измерений входных и выходных величин XTC в моменты времени  $k = \overline{1, N}$ . Измеренные величины используются в качестве значений соответствующих сигналов модели (2.22).

Умножая уравнение (2.23) на  $\phi_\mu[X^m[k], k]$ , обозначая эту величину для краткости через  $\phi_\mu[k]$  и суммируя по  $k$  от 1 до  $N$ , получают:

$$\sum_{k, v=1}^N \phi_v[k] \phi_\mu[k] \hat{a}_v = \sum_{k=1}^N y^m[k] \phi_\mu[k]. \quad (2.27)$$

Обычно матрица размера  $(N \times N)$

$$\left[ \sum_{k=1}^N \phi_v[k] \phi_\mu[k] \right] \quad (2.28)$$

при достаточно большом  $N$  лучше обусловлена, чем матрица (2.25). Считая эту матрицу невырожденной, из (2.27) получаем

$$\hat{A} = \left[ \sum_{k=1}^N \phi_v[k] \phi_\mu[k] \right]^{-1} \sum_{k=1}^N y^m[k] \phi_\mu[k]. \quad (2.29)$$

Случайные ошибки, входящие в измерения (в величины  $X^m[k]$ ,  $y^m[k]$ ) и имеющие интервалы корреляции меньше  $N$ , при суммировании произведений заметно сглаживаются. Это, а также улучшенная обусловленность матрицы (2.28) являются достоинствами метода. Однако метод требует числа измерений, равного числу параметров, и связан с обращением матрицы размером  $(N \times N)$ , что является существенным недостатком.

**Метод наименьших квадратов.** Число измерений при использовании МНК может как превышать число неизвестных параметров  $N$ , так и быть меньше этого числа. Допустим, что XTC описывается уравнением вида:

$$y[k] = \sum_{v=1}^N a_v \phi_v[\bar{X}[k]]. \quad (2.30)$$

Входная (в общем случае векторная) величина XTC  $\bar{X}[k]$  измеряется точно ( $k = \overline{1, L}$ ), а выходная величина — со случайной ошибкой  $\eta[k]$ , значения которой в различные моменты времени центрированы и независимы (белая последовательность случайных величин).

Идентификация выполняется для модели XTC вида:

$$y[k] = y^M[k] + \eta[k] = \sum_{v=1}^N \hat{a}_v \phi_v[\bar{X}[k]]. \quad (2.31)$$

Согласно МНК, наилучшая оценка коэффициента  $\hat{a}$  соответствует выражению:

$$\hat{a} = \arg \min_{\hat{a}} \epsilon \left\{ \sum_{k=1}^L [y^M[k] - \hat{A}^T \Phi(X[k])]^2 \right\}, \quad (2.32)$$

где  $\epsilon$  – символ безусловного математического ожидания на распределении величины  $\eta$ .

Раскрывая выражение (2.32), записывая необходимое и достаточное условие минимума квадратичной функции и предполагая, что матрица

$$\left[ \sum_{k=1}^L \phi_v(\bar{X}[k]) \phi_\mu(\bar{X}[k]) \right] \quad (2.33)$$

невырожденная, получают:

$$\hat{A} = \left[ \sum_{k=1}^L \phi_v([k]) \phi_\mu([k]) \right]^{-1} \sum_{k=1}^L y[k] \phi[k]. \quad (2.34)$$

При  $L = N$  выражение (2.34) совпадает с (2.29).

Методы пассивного эксперимента, используемые при идентификации статических режимов XTC следующие: метод регрессионного анализа, метод корреляционного анализа, метод конфлюэнтного анализа, а также метод стохастической аппроксимации для нестационарных объектов, параметры которых обладают дрейфом.

Если исследуемая XTC имеет достаточно большое число входных переменных и имеющаяся ЭВМ не в состоянии обработать требуемое число данных методом множественной регрессии, то коэффициенты искомого уравнения оценивают, используя последовательный алгоритм метода стохастической аппроксимации (МСА). МСА позволяет найти последовательность оценок  $\hat{a}_v[k]$ ,  $k = 0, 1, 2, \dots$  без составления и решения системы нормальных уравнений. Процедура МСА имеет вид:

$$\hat{a}_v[k+1] = \hat{a}_v[k] - \gamma[k+1] \left[ y[k] - \sum_{j=1}^N \hat{a}_v[k] \phi_j(x[k+1]) \right] \phi_i(x[k+1]), \quad (2.35)$$

где  $\gamma[k]$  – последовательность положительных чисел, выбираемая из условий Роббинса–Монро обеспечения устойчивости алгоритма идентификации.

Модели более высоких порядков при постановке пассивного эксперимента могут дать методы эвристической самоорганизации, в частности *метод группового учета аргументов* (МГУА).

Процесс идентификации по МГУА охватывает более широкую область, где соотношение между числом  $M$  членов полинома регрессии и числом узлов интерполяции может быть самым различным, в то время как по МРА необходимо, чтобы  $n < N$ . На практике при построении математических моделей целесообразно планирование активного эксперимента: ортогональное, ротабельное,  $D$ -оптимальное и др. Методы полного факторного эксперимента (ПФЭ) позволяют получить оценки коэффициентов уравнения регрессии вида:

$$y_k = a_{0k} + \sum_{i=1}^p a_{ik} x_i + \sum_{i,j=1}^p a_{ijk} x_i x_j. \quad (2.36)$$

Число необходимых экспериментов для ПФЭ  $M = 2^p$ , а для дробного (ДФЭ)  $M = 2^{(p-k)}$ , где  $k$  определяет дробную реплику от ПФЭ ( $k = 1, 2, \dots, k < p$ ). На ПФЭ и ДФЭ основаны также методы идентификации статических моделей с нестационарными параметрами. Ортогональное и ротабельное центральное композиционное планирование дает возможность построить модель в виде квадратного полинома.

Рассмотренные пассивные и активные методы позволяют построить «одноразовую» модель для определенного интервала времени эксплуатации ХТС. Но полученная «одноразовая» модель со временем теряет точность, и, если не принять специальных мер по изменению параметров модели, может оказаться практически непригодной. Для настройки параметров модели необходимо использовать методы адаптации и самообучения.

### 2.3. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ – ОСНОВНОЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ПРОЕКТИРОВАНИЯ И ЭКСПЛУАТАЦИИ ХТС

Стратегию применения математических моделей, а также принципов и методов синтеза, анализа и оптимизации ХТС, методов теории управления при решении задач проектирования и эксплуатации ХТС можно условно представить в виде четырехуровневой иерархической структуры (рис. 2.3). Метод математического моделирования основан на использовании некоторой гомоморфной математической модели ХТС (1.2) и (1.3), которая дает возможность при заданных значениях векторов входных переменных ( $\bar{X}$ ), параметров элементов ХТС ( $\bar{K}$ ), параметров окружающей среды ( $\bar{I}$ ), заданной технологической топологии системы ( $G$ ) и выбранном КЭ с некоторой точностью определить значения векторов выходных переменных ХТС ( $\bar{Y}$ ), оценок свойств ( $\bar{S}$ ) и величину КЭ функционирования ХТС ( $\psi_0$ ).

Рассмотрим сравнительную характеристику задач проектирования и эксплуатации ХТС, особо выделяя специфику использования ММ принципов и методов синтеза, анализа и оптимизации ХТС при поиске решения этих задач:

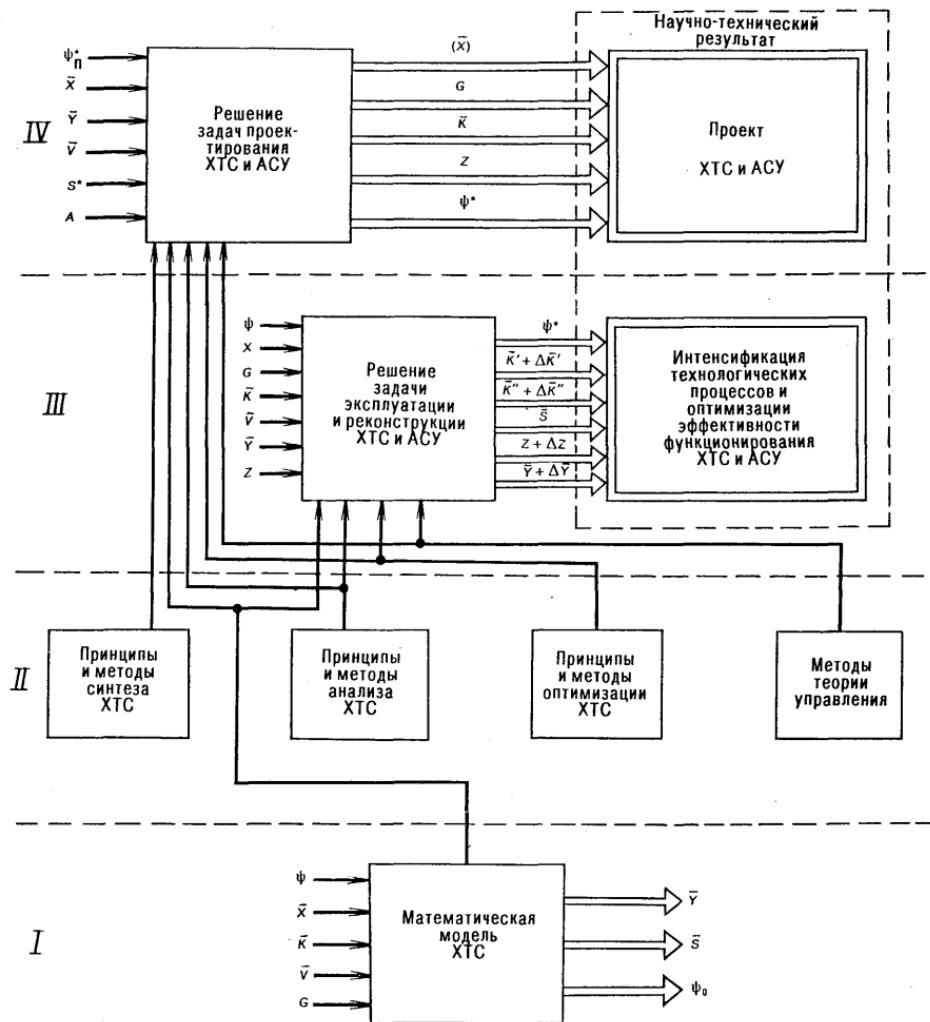


Рис. 2.3. Стратегия использования метода математического моделирования для решения задач проектирования и эксплуатации XTC:

$\bar{X}$  вектор входных переменных XTC;  $\bar{Y}$  – вектор выходных переменных XTC;  $\bar{Z}$  – вектор внутренних переменных XTC;  $\bar{k}$  – вектор параметров элементов XTC;  $\bar{K}'(\bar{K}'')$  – вектор технологических (конструкционных) параметров элементов XTC;  $\bar{V}$  – вектор параметров окружающей среды;  $G$  – технологическая топология XTC;  $S$  – вектор свойств XTC;  $S^*$  – желаемые предельные значения  $S$  при современном уровне аппаратурного оформления XTP;  $\Delta$  – вариации изменения векторов;  $\Psi$  – критерий эффективности XTC;  $\Psi_0$  – некоторое значение КЭ;  $\Psi^*$  – оптимальное значение;  $\Psi_n^*$  – предельное оптимальное значение КЭ действующих XTC;  $A$  – современный уровень аппаратурного оформления;  $I-IV$  – уровни сложности задач проектирования и эксплуатации XTC

1) задача проектирования ХТС представляет собой краевую задачу, в результате решения которой определяются технологическая топология ( $G$ ) и параметры элементов ( $\bar{K}$ ) ХТС, оптимально осуществляющей в соответствии с каким-либо КЭ преобразования заданных потоков сырья (вектор  $\bar{X}$ ) в заданные потоки химических продуктов (вектор  $\bar{Y}$ );

2) задача эксплуатации ХТС – это задача с начальными условиями, в результате решения которой определяются вектор выходных ( $\bar{Y}$ ) и внутренних переменных ХТС ( $\bar{Z}$ ), а также изменение значений вектора технологических параметров элементов ( $\bar{K}'$ ) [в ряде случаев, и вектора конструкционных параметров элементов ( $\bar{K}''$ )], обеспечивающих интенсификацию ХТП и оптимизацию режимов функционирования действующей ХТС;

3) уровень сложности научно-технических операций, возникающих при решении задачи проектирования ХТС, намного выше, чем при решении задачи эксплуатации ХТС;

4) при решении задач проектирования и эксплуатации ХТС наряду с математическим моделированием широко применяется физическое моделирование. Метод физического моделирования используется для нахождения границ деформации коэффициентов уравнений ММ отдельных ХТП (в ряде случаев определяются и границы деформации функционального вида этих уравнений), и тем самым – для масштабирования ХТП и аппаратов реальной ХТС, созданных на основе принятых априорных ММ и для установления адекватности этой ММ реальным ХТП.

Более подробно рассмотрим характеристику некоторых основных аспектов и преимуществ использования математического моделирования при проектировании ХТС. Математическое моделирование является весьма эффективным средством сравнительной оценки альтернативных вариантов технологической топологии сложной ХТС при проектировании.

К задачам оценки возможных вариантов технологической топологии сложных ХТС тесно примыкают задачи, которые связаны с выбором таких параметров элементов ХТС, которые обеспечивают согласование элементов между собой по их производительности при функционировании системы. Для этого необходимо по результатам математического моделирования оценить производительность отдельных элементов, технологических блоков и узлов, провести расчеты для выбора соответствующих конструкционных и технологических параметров элементов, проверив приемлемость полученных результатов путем моделирования всей системы в целом.

Важное значение имеет использование математического моделирования при проектировании сложных ХТС и в связи с разработкой проекта АСУ.

Перед сооружением головного промышленного образца ХТС необходимо детальное обследование принятого в проекте вари-

анта с использованием математического моделирования и методов анализа ХТС. При этом может быть получена хотя и предварительная, но достаточно обоснованная оценка характеристик системы. Анализ результатов моделирования поможет вскрыть слабые стороны проекта, обнаружить узкие места, оценить согласованность отдельных элементов. Такое обследование позволит внести необходимые корректизы в проект, улучшить принятый вариант, а параметры элементов и параметры технологического режима ХТС выбрать наиболее обоснованно.

## 2.4 ПОСТАНОВКА И ПРИНЦИПЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ АНАЛИЗА ХТС

Решение разнообразных практических задач проектирования и эксплуатации ХТС сводится к решению следующих классов задач анализа ХТС: задачи анализа материально-тепловых нагрузок на элементы ХТС; задачи поверочного анализа статических режимов ХТС; задачи проектного анализа статических режимов ХТС при заданных ограничениях на значения выходных переменных ХТС.

Задачи анализа материально-тепловых нагрузок на элементы ХТС – это задачи расчета материально-тепловых балансов (МТБ) ХТС, в результате решения которых при заданных значениях массовых расходов и составов потоков сырья ХТС определяют значения массовых расходов и покомпонентных составов потоков продуктов и полупродуктов; массовых расходов потоков сточных вод и выбросов вредных газов в атмосферу; расходов греющего пара, охлаждающей воды и электроэнергии.

Расчет МТБ в условиях установившегося (статического) технологического режима – это основная операция проектирования новых и анализа действующих ХТС. При проектировании ХТС значения материально-тепловых нагрузок и производительностей элементов ХТС представляют собой исходную информацию для расчета значений технологических и конструкционных параметров элементов ХТС, а также для расчета значений удельных расходных норм, или расходных коэффициентов сырья и ТЭР. В условиях промышленной эксплуатации ХТС на основе расчета систем управлений МТБ выявляют неучтенные потери вещества и ТЭР; определяют для АСУ величины таких воздействий, которые в ХТС не измеряются автоматически, что повышает качество управления ХТП; оценивают влияние ошибок измерений контролируемых параметров на величину рассчитываемых параметров ТП.

Расчет МТБ состоит из двух последовательных этапов:  
1) постановка задачи и составление системы уравнения МТБ;  
2) решение системы уравнений МТБ.

Методика составления СУ материально-тепловых балансов ХТС на основе использования законов сохранения массы и энер-

гии, а также обобщенного упрощенного описания физико-химической сущности ХТС без составления для каждого элемента ХТС системы уравнений ММ вида (2.1) подробно излагается в разделах 2.6 и 2.7.

В дальнейшем при математической формулировке задачи поверочного и проектного анализа статических режимов ХТС для простоты записи ММ системы предположим, что каждый элемент имеет один входной и один выходной ТП. В отличие от ранее принятой формы ММ (2.1) запишем ММ  $k$ -го элемента в более общем неявном виде:

$$\bar{\phi}^{(k)}(\bar{V}^{(k)}, \bar{W}^{(k)}, \bar{U}^{(k)}) = 0, \quad (2.37)$$

где  $\bar{V}^{(k)} = (v_1^{(k)}, \dots, v_m^{(k)})$ ,  $\bar{W}^{(k)} = (w_1^{(k)}, \dots, w_m^{(k)})$  –  $m$ -мерные векторы переменных входного и выходного ТП;  $\bar{U}^{(k)} = (u_1^{(k)}, \dots, u_r^{(k)})$  –  $r$ -мерный вектор управляющих переменных элементов, который при анализе ХТС задан;  $\bar{\phi}^{(k)} = (\varphi_1^{(k)}, \dots, \varphi_m^{(k)})$  –  $m$ -мерный вектор левых частей системы уравнений (2.30), записанной в неявной функциональной форме.

Выражение (2.37) представляет собой систему из  $m$  нелинейных уравнений с  $2m$  неизвестными. Если задать значения любых  $m$  чисел – координат векторов  $\bar{V}^{(k)}$  или  $\bar{W}^{(k)}$ , или значения части переменных  $\bar{V}^{(k)}$  и части  $\bar{W}^{(k)}$ , то система (2.37) позволяет найти значения остальных  $m$  переменных.

Систему уравнений структуры технологических связей ХТС (2.6) запишем в следующем виде:

$$v^{(k)} = \sum_{j=1}^N \delta_{kj} w^{(i)}, \quad \sum_{k=1}^N \delta_{kj} = 1; \quad j = \overline{1, N}; \quad k = \overline{1, N}, \quad (2.38)$$

где  $v^{(k)}(w^{(i)})$  – входная (выходная) переменная  $k$ -го ( $i$ -го) элемента;  $\delta_{kj}$  – кэрп;  $N$  – общее число элементов ХТС.

*Задачи поверочного анализа статических режимов ХТС* – это задачи расчета переменных состояния ХТС, в результате решения которых при заданных технологической топологии ХТС, значениях входных и управляющих переменных ХТС определяют значения выходных переменных ХТС. Математическая задача расчета переменных состояния ХТС представляет собой задачу решения системы  $2N_m$  нелинейных уравнений (2.37) и (2.38) с  $2N_m$  неизвестными:  $\bar{V}^{(k)}$  и  $\bar{W}^{(k)}$  ( $k = \overline{1, N}$ ).

*Задачи проектного анализа статических режимов ХТС* при заданных ограничениях на значения выходных переменных ХТС – это задачи расчета значений входных и управляющих переменных ХТС.

Рассмотрим математическую формулировку задачи проектного анализа ХТС. В этом случае систему уравнений математической модели ХТС (2.37) и (2.38) необходимо дополнить уравнениями ограничений на значения выходных переменных ХТС (2.13). Полученную систему уравнений (2.37), (2.38) и (2.13) необходимо решать совместно. Поскольку число уравнений

(2.37), (2.38) и (2.13) стало равно  $(2N_m + \tilde{g})$ , т. е. увеличилось на величину  $\tilde{g}$ , на столько же должно увеличиться число неизвестных переменных. Число  $\tilde{g}$  – это число дополнительных неизвестных управляющих или входных переменных XTC, которые при поверочном анализе были заданы. Для определенности будем считать, что в число неизвестных переменных XTC  $\tilde{g}$  включаются все управляющие переменные и некоторые произвольные входные переменные XTC (2.16).

Для решения задач проектного анализа XTC можно применять *двууровневый и одноуровневый подход*. При *двууровневом*, или декомпозиционном подходе на первом уровне решают уравнения (2.37) и (2.38), а на втором уровне осуществляют подбор значений входных и управляющих переменных (2.16), при которых удовлетворяются ограничения на назначения выходных переменных (2.13). Очевидно, что на первом уровне решается задача поверочного анализа данной XTC.

При *одноуровневом подходе* одновременно решается система уравнений (2.37), (2.38) и (2.13) относительно неизвестных значений входных и управляющих переменных ( $\bar{X}, \bar{U}$ ). Для поиска решений задач поверочного и проектного анализа XTC применяют различные принципы и способы, классификация которых представлена на рис. 2.4.

Выделяют два принципа решения задач анализа XTC: *блочный* и *информационный*. При использовании *блочного* принципа система уравнений ММ каждого элемента XTC представляет собой единый математический оператор без выделения процедур решения для отдельных уравнений. Это означает, что систему уравнений ММ каждого элемента XTC с учетом систем уравнений структуры технологических связей (2.38) можно рассчитать только тогда, когда задан любой набор  $m$  его входных (выход-



Рис. 2.4. Классификация принципов и способов анализа XTC

ных) переменных, для которого определяют численные значения оставшихся  $t$  выходных (входных) переменных элемента.

При использовании информационного принципа системы уравнений ММ всех элементов ХТС вида (2.1) или (2.37) и системы уравнений структуры технологических связей (2.38) объединяются в единую систему уравнений. Для поиска решений этой единой системы уравнений (2.37) и (2.38) можно применять процедуры решения отдельных уравнений без учета их принадлежности к математическому описанию определенных элементов ХТС. Это означает, что по заданным значениям всех (или части) координат вектора  $\bar{V}^{(k)}$  можно рассчитывать значения (одной или нескольких) координат вектора  $\bar{W}^{(k)}$ , или наоборот.

К особенностям информационного принципа анализа ХТС можно отнести большую размерность и функционально-операторную уникальность каждой единой СУ. Указанные особенности вызывают определенные трудности численного решения единой системы уравнений ХТС, обусловленные ограниченностью быстродействия и объема памяти оперативного запоминающего устройства (ОЗУ) ЭВМ, а также необходимостью иметь разнообразное программное обеспечение для решения весьма различных функционально-операторных видов уравнений математического описания ХТС.

Для разработки высокоеффективных алгоритмов решения многомерных СУ необходимо учитывать особенности их информационной структуры, которые рассмотрены в разд. 2.6. Основу высокоеффективных алгоритмов решения многомерных систем уравнений ХТС образуют алгоритмы оптимальной стратегии решения системы уравнений. Алгоритмы оптимальной стратегии, или порядка решения устанавливают оптимальную последовательность решения отдельных уравнений многомерной ММ, которая обеспечивает оптимальные затраты требуемого объема памяти ОЗУ и времени на проведение итерационных вычислений. Для разработки алгоритмов оптимальной стратегии решения многомерных СУ используют специальные топологические модели (см. разд. 4.5).

Применение информационного принципа анализа ХТС весьма затруднительно или даже практически невозможно для ХТС с элементами, ММ которых представляют собой либо системы дифференциальных уравнений (ДУ) в частных производных, либо алгебраические уравнения со сложными нелинейностями, либо трансцендентные уравнения.

В связи с этими недостатками информационного принципа при анализе ХТС наиболее широко используется блочный принцип. Однако в ряде случаев с учетом особенностей информационной структуры единой системы уравнений ХТС, которые рассмотрены в разделе 2.6, применение информационного принципа анализа встречено-направленных ХТС по сравнению с блочным

принципом позволяет исключить из вычислительных операций итерационные процедуры типа вычислений «цикл в цикле». Вычисления «цикл в цикле» появляются при блочном принципе анализа встречно-направленных ХТС в том случае, когда в простые контуры ХТС входят элементы, требующие для расчета их систем уравнений ММ (2.1) итерационных процедур.

## 2.5 ХАРАКТЕРИСТИКА БЛОЧНОГО ПРИНЦИПА АНАЛИЗА ХТС

При блочном принципе анализа ХТС возможно использовать параллельный и последовательный способы расчета технологических режимов ХТС (см. рис. 2.4). В свою очередь, параллельный, или совместный способ расчета ХТС подразделяют на одноуровневый и аппроксимационно-двухуровневый. При одноуровневом параллельном способе поверочного анализа ХТС все переменные  $\bar{V}^{(k)}$  и  $\bar{W}^{(k)}$  каждого  $k$ -го элемента ХТС рассматриваются одновременно как итерируемые расчетные переменные, для определения численного значения которых необходимо одновременно решать систему  $2Nm$  нелинейных уравнений (2.37) и (2.38) с  $2Nm$  неизвестными  $\bar{V}^{(k)}$  и  $\bar{W}^{(k)}$  ( $k = 1, N$ ).

Если для каждого элемента ХТС исключить выходные переменные  $\bar{Y}^{(k)}$ , осуществив подстановку в систему уравнений структуры технологических связей (2.6) системы уравнений (2.1), то получается система  $Nm$  нелинейных уравнений вида:

$$\tilde{\mathfrak{F}}(\bar{X}) \equiv \bar{X}^{(k)} - \sum_{j=1}^N \delta_{kj} F^{(j)}(\bar{X}^{(j)}, \bar{U}^{(j)}) = 0 \quad (2.39)$$

относительно  $N_m$  неизвестных  $\bar{X}^{(k)}$  ( $k = 1, N$ ).

При аппроксимационно-двухуровневом параллельном способе поверочного анализа ХТС все переменные  $\bar{V}^{(k)}$  и  $\bar{W}^{(k)}$  рассматриваются как итерируемые расчетные переменные, при этом на каждом  $p$ -м шаге итерационных вычислений проводится аппроксимация систем уравнений ММ всех элементов ХТС (2.37) матричными линейными уравнениями

$$\bar{Y}^{(k)} = [R^{(k)}] \times \bar{X}^{(k)}, \quad (2.40)$$

где  $[R^{(k)}]$  – матрица преобразований  $k$ -го элемента (см. разд. 3.5).

В результате решения матричных уравнений (2.40) с использованием точных или приближенных (итеративных) методов линейной алгебры каждый раз получают новую точку стационарного режима ХТС, в которой опять проводится линеаризация ММ (2.37).

Последовательный, или раздельный, способ анализа ХТС подразделяют на технологическо-направленный и информационно-направленный. Сущность технологическо-направленного способа поверочного анализа ХТС состоит в том, что порядок, или

стратегию расчета элементов ХТС выбирают в соответствии с направлением некоторых технологических потоков ХТС.

Порядок, или стратегия, расчетов ХТС состоит из совокупности нескольких этапов, или уровней, на каждом из которых рассчитывается система уравнений ММ (2.37) только элемента ХТС, имеющего известные векторы всех входных ТП и управляющих переменных. Для однонаправленных ХТС порядок расчета элементов непосредственно совпадает с направлением ТП в системе от входных ТП сырья к выходным ТП продуктов и полупродуктов. Для однонаправленной ХТС, структурная схема которой изображена на рис. 2.5, а, порядок расчета элементов при последовательном способе поверочного анализа представлен на рис. 2.5, б.

Для встречно-направленных ХТС такая простая последовательность расчета элементов ХТС в направлении от входных ТП сырья к выходным ТП продуктов невозможна, так как для любого простого контура ХТС (см. разд. 1.3) переменные обратного ТП, который поступает с выхода  $j$ -го последующего элемента на вход  $i$ -го предыдущего элемента, при расчете этого  $i$ -го элемента уже должны быть известны до расчета  $j$ -го последующего элемента.

Разработка порядка расчета элементов встречно-направленных ХТС базируется на процедуре разрыва обратных ТП. В каждом простом контуре процедура разрыва всех обратных ТП превращает исходную встречно-направленную ХТС в некоторую эквивалентную одностороннюю ХТС в результате разделения обратного ТП между  $i$ -м и  $j$ -м элементами системы  $Z_{ji}$  на выходной ТП  $j$ -го элемента  $\bar{Y}_j^*$ , который становится новым выходным потоком ХТС, и на входной поток  $i$ -го элемента  $\bar{X}_i^*$ , который становится новым входным ТП системы, разделение должно происходить таким образом, чтобы выполнилось для

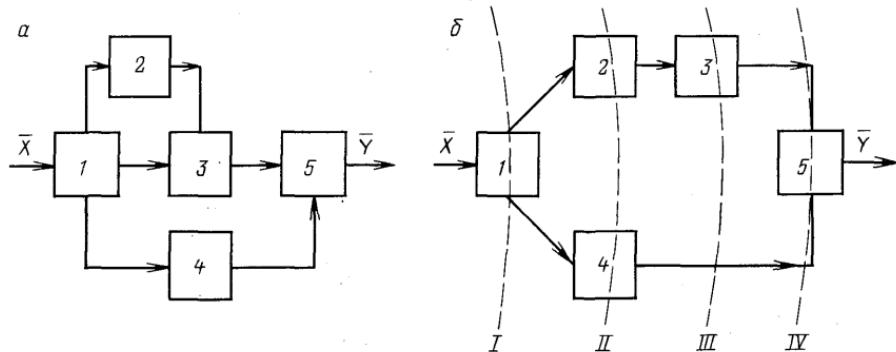


Рис. 2.5. Структурная схема (а) и порядок расчета элементов при последовательном способе поверочного анализа (б) однонаправленной ХТС.

1–5 – элементы ХТС; I–IV – этапы расчета элементов ХТС

этих новых выходных и входных ТП ограничение:

$$\bar{Z}_{ji}^{(p)} = \bar{X}_i^{*(p)} = \bar{Y}_j^{*(p)}, \quad p = \overline{1, n}, \quad (2.41)$$

где  $n$  – число разрываемых ТП в структуре исходной встречно-направленной ХТС.

Например, чтобы преобразовать одноконтурную ХТС (рис. 2.6, а) в эквивалентную одностороннюю ХТС, можно выбрать в качестве разрываемого ТП либо обратный ТП  $\bar{Z}_{3-1}$  (рис. 2.6, б), либо промежуточный ТП  $\bar{Z}_{1-2}$  (рис. 2.6, в). Порядок расчета элементов этой одноконтурной ХТС для двух вариантов выбора разрываемых ТП изображен на рис. 2.7.

Для двухконтурной взаимосвязанной ХТС (рис. 2.8, а) при разрыве двух обратных ТП  $\bar{Z}_{3-2}$  и  $\bar{Z}_{4-1}$  (рис. 2.8, б) или только одного промежуточного ТП  $\bar{Z}_{2-3}$  (рис. 2.8, в и 2.8, г) эта ХТС преобразуется в одностороннюю.

Таким образом, в общем случае для преобразования встречно-направленной многоконтурной ХТС в эквивалентную одностороннюю в качестве разрываемых можно выбрать произвольные ТП, которые в дальнейшем будем называть *особыми разрываемыми ТП*.

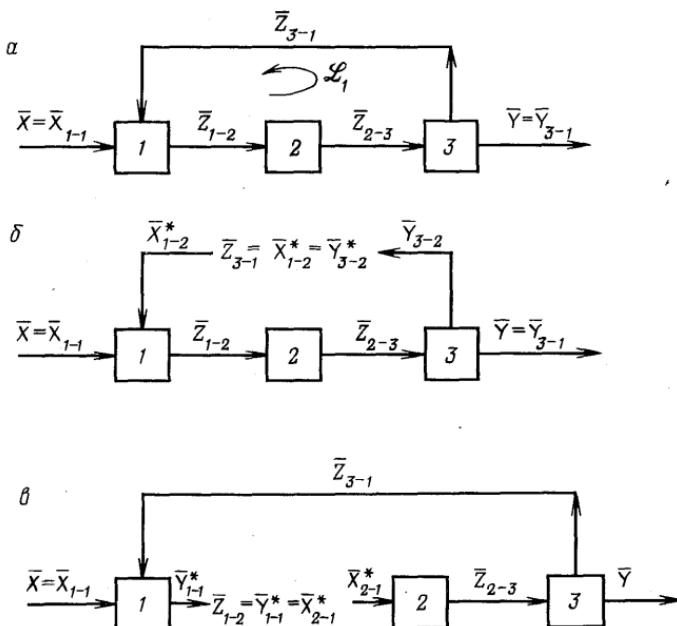


Рис. 2.6. Исходная одноконтурная ХТС (а) и эквивалентные односторонние ХТС: разрываемый поток-обратный  $\bar{Z}_{3-1}$  (б) и промежуточный  $\bar{Z}_{1-2}$  (в),  $L_1$  – простой контур:

1-3 – элементы ХТС

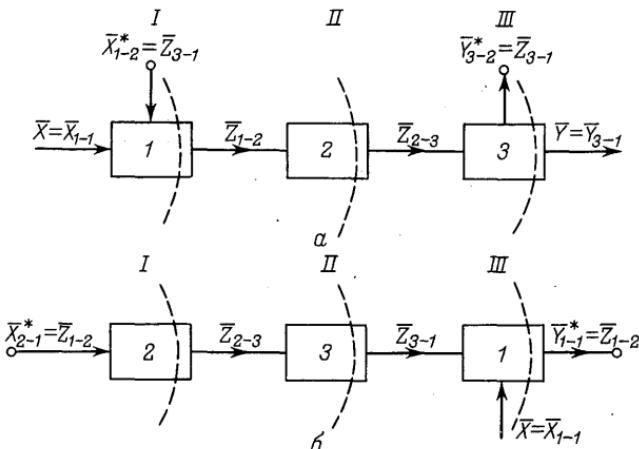


Рис. 2.7. Порядок расчета элементов одноконтурной ХТС для двух вариантов выбора разрываемых технологических потоков (см. рис. 2.6, б, в):

1–3 – элементы ХТС; I–III – этапы расчета элементов ХТС

При образовании из исходной встречно-направленной ХТС эквивалентной односторонней для особых разрываемых ТП справедливы следующие соотношения:

$$\bar{Y}^{*(p)} = \bar{F}^{(p)}(\bar{X}^{*(1)}, \dots, \bar{X}^{*(p)}), \quad p = \overline{1, n}; \quad (2.42)$$

поставив (2.42) в выражение (2.41), получают систему нелинейных уравнений (СНУ) в явном виде

$$\bar{X}^{*(p)} = \bar{F}^{(p)}(\bar{X}^{*(1)}, \dots, \bar{X}^{*(p)}), \quad p = \overline{1, n} \quad (2.43)$$

или в неявном виде

$$\bar{\mathfrak{F}}^{(p)}(\bar{X}^{*(1)}, \dots, \bar{X}^{*(p)}) = 0, \quad p = \overline{1, n}. \quad (2.44)$$

Порядок этой СНУ (2.44) равен:

$$n = \sum_{j=1}^p \pi_j, \quad (2.45)$$

где  $\pi_j$  – параметричность особых разрываемых ТП.

Для численного решения СНУ (2.44) можно использовать различные итеративные методы, которые подробно рассматриваются в гл. 7.

Алгоритмы оптимизации стратегии последовательного способа поверочного анализа ХТС с использованием процедуры разрыва особых ТП на основе применения топологических моделей изложены в разд. 6.1.

Сущность информационно-направленного последовательного способа поверочного и проектного анализа ХТС состоит в том,

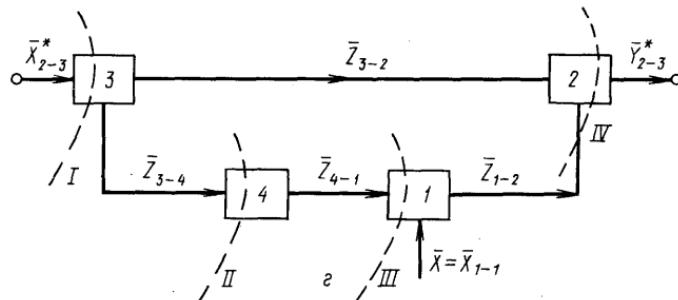
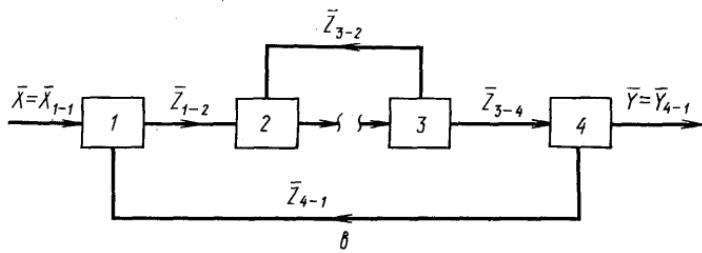
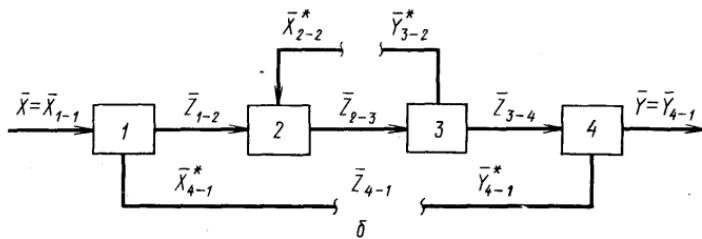
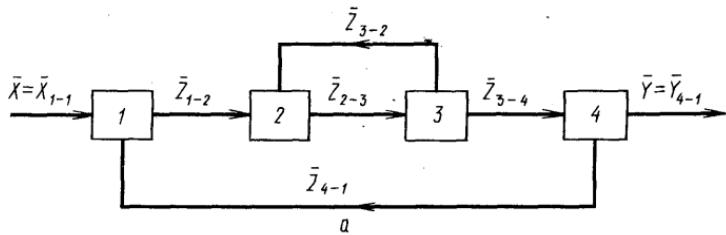


Рис. 2.8. Исходная двухконтурная взаимосвязанная XTC (a) и эквивалентные односторонние XTC: разрываемые потоки – два обратных  $\bar{Z}_{3-2}$  и  $\bar{Z}_{4-1}$  (б) или один промежуточный  $\bar{Z}_{2-3}$  (в); порядок расчета эквивалентной XTC при разрыве только одного промежуточного ТП  $\bar{Z}_{2-3}$  (г); I–IV – этапы расчета элементов XTC

что каждый элемент ХТС рассматривается как *информационный оператор* (ИО), а каждая переменная векторов ТП системы рассматривается как направленный *информационный поток* (ИПТ). Направление ИПТ может как совпадать, так и не совпадать с направлением соответствующего ТП.

Каждый ИО преобразует входные ИПТ в выходные ИПТ. Информационный поток, соответствующий одной и той же переменной ХТС, при изменении (в зависимости от постановки задачи анализа ХТС) роли этой переменной (входная, выходная, закрепленная или произвольная) может изменять свое направление. В результате этого изменяется структура всех информационных связей между ИО. Выбор оптимального направления ИПТ между ИО позволяет разрабатывать высокоэффективные алгоритмы стратегии решения задач проектного и поверочного анализа ХТС, обеспечивающие оптимальные затраты объема памяти ОЗУ и времени на проведение итерационных вычислений. Более подробные сведения об информационно-направленном способе анализа ХТС приводятся в разделах 3.1 и 3.2. Для разработки алгоритмов выбора оптимального направления информационных потоков ХТС используют специальные топологические модели (см. разд. 4.5).

Таким образом, математически задачи поверочного и проектного анализов ХТС с использованием рассмотренных ранее различных принципов и способов представляют собой задачи решения некоторых систем нелинейных уравнений (СНУ) вида (2.39) и (2.44). Необходимо отметить, что имеется определенная специфика решения СНУ при использовании блочного принципа анализа ХТС: при заданных значениях входных переменных ХТС нельзя рассчитать отдельно левую часть одного или нескольких уравнений системы (2.39), рассчитать их можно только совместно. Это обстоятельство не позволяет использовать такие методы решения СНУ, в которых предусмотрена обработка каждого уравнения системы (2.39) в отдельности. Методы решения СНУ подробно изложены в гл. 7.

## 2.6. ОБЩИЙ ВИД СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕПЛОВЫХ БАЛАНСОВ ХТС

При составлении систем уравнений МТБ используют следующие основные предположения:

- 1) ХТС находится в статическом, или установившемся технологическом режиме;
- 2) взаимодействие между элементами ХТС, а также между данной системой и окружающей средой происходит через определенное число физических потоков;
- 3) рассматривают определенный момент или интервал времени функционирования ХТС;

4) выделяют внешние и внутренние источники (стоки) вещества и энергии ХТС.

Физические потоки ХТС могут быть двух видов: ТП, которые обеспечивают целенаправленное функционирование ХТС, и условные потоки, отображающие рассеивание (потери) вещества и энергии ХТС в окружающую среду, а также различного рода возмущающие воздействия на функционирование ХТС.

Внешние источники вещества или энергии ХТС соответствуют физическим потокам, которые поступают в систему на физико-химическую переработку и обеспечивают ее функционирование. Внешние стоки вещества или энергии ХТС соответствуют физическим потокам, образующимся в результате функционирования системы.

Внутренние источники (стоки) отображают качественные изменения в процессе функционирования ХТС и соответствуют эффектам химических и физических превращений, происходящих внутри элементов системы. Внутренний источник вещества (сток) соответствует количеству вещества, образовавшегося в результате химического превращения (вступившего в реакцию); внутренний источник теплоты (сток) – количеству тепла, выделяющемуся (поглощающемуся) в результате протекания внутри элементов ХТС химических и физических превращений. Каждому внутреннему источнику (стоку) вещества отвечает фиктивный поток вещества, а каждому внутреннему источнику (стоку) теплоты – фиктивный тепловой поток.

В общем случае для некоторого элемента ХТС и любой ХТС при бесконечно малом периоде времени  $[\tau, \tau + dt]$  на основе законов сохранения массы и энергии можно записать для некоторой величины  $W$ , представляющей собой массу или теплоту потока, уравнение баланса (материального или теплового) в следующем виде:

$$\sum_{j=1}^{n_x} \dot{W}_j(\tau) + \sum_{l=1}^v \dot{W}_l^*(\tau) = \sum_{i=1}^{n_y} \dot{W}_i(\tau) + \sum_{e=1}^w \dot{W}_e^{**}(\tau) + C(W) \times (dW/dt) \quad (2.46)$$

где  $\dot{W}_j(\dot{W}_i)$  – скорость для величины  $j$ -го ( $i$ -го) потока  $W$  на входе (выходе ХТС);  $\dot{W}_l^*(\dot{W}_e^{**})$  – скорость образования (исчезновения) в фиктивных источниках (стоках) величины  $W$  внутри элементов ХТС;  $j = 1, n_x$  ( $i = 1, n_y$ ) – число входных (выходных) физических потоков ХТС;  $l = 1, v$  ( $e = 1, w$ ) – число фиктивных источников (стоков) ХТС;  $C(W) \times (dW/dt)$  – скорость накопления величины  $W$  внутри элементов ХТС;  $C(W)$  – параметр, характеризующий способность элементов ХТС накапливать вещества или теплоту.

Для установившегося режима ХТС уравнение баланса (2.46) имеет вид:

$$\sum_{j=1}^{n_x} \dot{W}_j(\tau) + \sum_{l=1}^v \dot{W}_l^* - \sum_{e=1}^w \dot{W}_e^{**}(\tau) - \sum_{i=1}^{n_y} \dot{W}_i(\tau) = 0. \quad (2.47)$$

Для ХТС с периодическим режимом функционирования уравнение (2.46) можно записать следующим образом:

$$\sum_{j=1}^{n_x} \int_{\tau}^{\tau+T} \dot{W}_j(\tau) d\tau + \sum_{l=1}^v \int_{\tau}^{\tau+T} \dot{W}_l^*(\tau) d\tau - \sum_{e=1}^w \int_{\tau}^{\tau+T} W_e^{**}(\tau) d\tau - \sum_{i=1}^{n_y} \int_{\tau}^{\tau+T} \dot{W}_i(\tau) d\tau = 0, \quad (2.48)$$

где  $T$  – период работы ХТС;  $\int_{\tau}^{\tau+T} C(W) \times (dW(\tau)/d\tau) = 0$ .

Для ХТС на ограниченном интервале времени функционирования  $(\tau, \tau + \tau_1)$  уравнение (2.46) будет иметь вид:

$$\sum_{j=1}^{n_x} \int_{\tau}^{\tau+\tau_1} \dot{W}_j(\tau) d\tau + \sum_{l=1}^v \int_{\tau}^{\tau+\tau_1} \dot{W}_l^*(\tau) d\tau - \sum_{e=1}^w \int_{\tau}^{\tau+\tau_1} W_e^{**}(\tau) d\tau - \sum_{i=1}^{n_y} \int_{\tau}^{\tau+\tau_1} \dot{W}_i(\tau) d\tau - [W(\tau + \tau_1) - W(\tau)] = 0. \quad (2.49)$$

Математически СУ материально-тепловых балансов ХТС – это совокупность независимых уравнений, входящих в три группы систем уравнений: 1) СУ материального баланса ХТС; 2) СУ теплового баланса; 3) система уравнений физико-химических связей (УФХС). Рассмотрим физико-химическую сущность и математический вид каждой из указанных групп СУ, которые могут быть составлены для каждого отдельного элемента, подсистемы и для ХТС в целом.

Для каждого элемента (подсистемы) ХТС можно составить уравнения материального и теплового баланса вида (2.47):

*материального баланса по общему массовому расходу вещества физических потоков*

$$\sum_{j=1}^{n_x} m_j - \sum_{i=1}^{n_y} m_i = 0; \quad (2.50)$$

*материального баланса по массовому расходу  $i$ -го химического компонента (химических элементов) физических и фиктивных потоков вещества*

$$\sum_{j=1}^{n_x} m_j x_{jk} + \sum_{l=1}^v m_{lk}^* - \sum_{i=1}^{n_y} m_i x_{ik} - \sum_{e=1}^w m_{ek}^{**} = 0; \quad (2.51)$$

*теплового баланса по расходу тепла физических и фиктивных тепловых потоков*

$$\sum_{j=1}^{n_x} m_j h_j + \sum_{l=1}^v Q_l^* - \sum_{i=1}^{n_y} m_i h_i - \sum_{e=1}^w Q_e^{**} = 0 \quad (2.52)$$

или

$$\sum_{j=1}^{n_x} m_j \bar{C}_j t_j + \sum_{l=1}^v Q_l^* - \sum_{i=1}^{n_y} m_i \bar{C}_i t_i - \sum_{e=1}^w Q_e^{**} = 0, \quad (2.53)$$

где  $j$ -й ( $i$ -й) – входной (выходной) физический поток;  $m_j(m_i)$  – общий массовый расход вещества;  $x_{jk}$  – доля  $k$ -го компонента в единице общего расхода вещества  $m_j$ ;  $h_j$  – удельная энталпия;  $\bar{C}_j$  – средняя удельная теплоемкость;  $t_j$  – температура;  $m_{lk}^*(m_{ek}^*)$  – массовый расход  $k$ -го компонента в  $l$ -м ( $e$ -м) фиктивном источнике (стоке) вещества;  $Q_l^*(Q_e^*)$  – тепловой расход  $l$ -го ( $e$ -го) теплового фиктивного источника (стока);  $j = \overline{1, n_x}$ ;  $i = \overline{1, n_y}$ ;  $l = \overline{1, v}$ ;  $e = \overline{1, w}$ .

Если химические реакции протекают в неизотермических условиях, то тепловые балансы этих химических процессов необходимо составлять совместно с их материальными балансами.

В общем случае каждое из уравнений (2.51)–(2.53) представляют собой билинейную форму неизвестных параметров физических потоков ХТС, а система уравнений балансов (2.50)–(2.52) является СНУ. Однако, используя следующие специальные допущения, любую СНУ балансов можно представить в линейной форме:

- a) если  $m_j$  заданы, то система уравнений МТБ линейна относительно переменных  $x_{ji}$  и  $h_j$  (или  $t_j$ );
  - b) если  $x_{jk}$  и (или)  $h_j$  заданы, то система уравнений МТБ нелинейна относительно переменных  $m_j$ .  
}
- (2.54)

При выполнении условий линеаризации (2.54) каждая из систем уравнений (2.50)–(2.52), составленная для совокупности всех элементов ХТС может быть записана в матричной форме:

$$[A] \times [W] = 0, \quad (2.55)$$

где  $[W]$  – матрица-столбец балансовых величин (массы или теплоты) физических и фиктивных потоков ХТС;  $[A] = [a_{ij}]$  – матрица принадлежности потоков определенным элементам ХТС, общий элемент которой равен:

$$a_{ij} = \begin{cases} +1 (-1), & \text{если } j\text{-й поток входит (выходит) в } i\text{-й элемент ХТС;} \\ 0, & \text{если } j\text{-й поток не связан с } i\text{-м элементом;} \end{cases} \quad (2.56)$$

$i = \overline{1, N}$  – номера элементов ХТС,  $j = \overline{1, M}$  – номера фиктивных потоков ХТС.

С учетом особенностей технологической топологии ХТС (каждый ТП принадлежит только двум элементам ХТС; каждый элемент ХТС связан лишь с небольшим числом других элементов; число элементов ХТС всегда меньше числа ТП; все ТП имеют различную параметричность) информационная структура матрицы  $[A]$  является неплотной (редкой или разреженной). Неплотная, или разреженная матрица – это матрица, имеющая большое число нулевых элементов. Для оценки информационной структуры разреженных матриц используют два коэффициента: коэффициент разреженности –  $\beta_p = n_0/N$  и коэффициент насыщенности  $\beta_n = 1 - \beta_p$ , где  $n_0$  ( $N$ ) – число нулевых (общее число)

элементов матрицы  $[A]$ . Очевидно, что для неплотных матриц коэффициент насыщенности  $\beta_n \ll 1$ .

Необходимо особо отметить, что информационная структура СНУ как математического описания ХТС (2.37), (2.38) и (2.13), так и отдельных ХТП (2.1), является разреженной, так как соответствующие этим СНУ матрицы Якоби  $[J] = [\partial \phi_m / \partial x_k]$ , где  $\phi_m$  –  $m$ -е уравнение;  $x_k$  –  $k$ -я переменная СНУ, являются неплотными матрицами (см. раздел 7.5).

Рассмотрим вид уравнений физико-химических связей (УФХС), которые при расчете материальных и тепловых нагрузок элементов ХТС дополняют системы уравнений балансов (2.50)–(2.53). Уравнения физико-химических связей – это обобщенное упрощенное описание сущности физико-химических явлений, происходящих внутри элементов ХТС и влияющих на величину материально-тепловых нагрузок элементов. УФХС отображают: величину фiktивных источников (стоков) вещества и энергии внутри элементов ХТС; величину параметров фазового равновесия и физико-химических свойств веществ; величину технологических параметров элементов; покомпонентные составы физических потоков; взаимосвязь между физическими потоками при известных кПД элементов; зависимости параметров физических потоков от параметров технологических режимов, от производительности ХТС по выпуску товарных продуктов и т. д.

В общем случае УФХС можно рассматривать как неявные функции многих переменных:

$$\phi_i [\pi_i; \eta; \alpha; \vartheta; \beta; K; D(T, p)] = 0. \quad (2.57)$$

где  $\pi_i$  – параметры физических потоков;  $\eta$  – кПД элементов ХТС;  $\alpha$  – мольные соотношения компонентов, участвующих в реакции;  $\vartheta$  – стехиометрические коэффициенты;  $\beta$  – физико-химические константы;  $K(D)$  – конструкционные (технологические) параметры ХТС;  $T, p$  – параметры технологического режима.

Приведем выражения некоторых основных УФХС, используемых при расчете материальных балансов:

уравнения для расчета покомпонентного состава физических потоков

$$\sum_{k=1}^n x_{jk} = 1; \quad (2.58)$$

уравнения для расчета параметров равновесия двухфазных систем

$$K_j = K_j(T, p, \bar{x}); \quad (2.59)$$

уравнения для расчета значений фiktивных источников (стоков) веществ, участвующих в химических реакциях

$$n_k = n_k(v_k, v_i, u_i, n_{i0}), \quad (2.60)$$

где  $x_{jk}$  – доля  $k$ -го компонента в  $j$ -м физическом потоке;  $\bar{x}$  – вектор состава компонентов;  $T$  – температура,  $p$  – давление;  $n_k$  – число молей вещества в ходе реакции;

$n_{i0}$  – начальное число молей;  $\kappa_i$  – степень превращения  $i$ -го исходного вещества;  $v_{k(i)}$  – стехиометрические коэффициенты.

Рассмотрим виды некоторых основных УФХС, используемых при расчете тепловых балансов. Уравнения для расчета средней удельной теплоемкости физического потока:

для газов при температуре  $T [K]$

$$\bar{c} = a_0 + a_1 T + a_2 T^2; \quad (2.61)$$

для смесей веществ

$$\bar{c}_{\text{см}} = \frac{\sum_{k=1}^n m_k \bar{c}_k}{\sum_{k=1}^n m_k}, \quad (2.62)$$

где  $m_k$  ( $\bar{c}_k$ ) – массовый расход (средняя удельная теплоемкость)  $k$ -го вещества в потоке.

Уравнение для расчета энталпии веществ:

$$H_j = H_j(T_j, p_j, x_{ji}), \quad (2.63)$$

где  $H_j$  – энталпия;  $T_j$  – температура;  $p_j$  – давление;  $x_{ji}$  – доля  $i$ -го химического компонента в  $j$ -м физическом потоке.

Уравнение для определения физических источников (стоков) теплоты при фазовых переходах физических процессов:

$$Q^* = \sum_{i=1}^n m_i r_i, \quad (2.64)$$

где  $m_i$  – массовый расход  $i$ -го компонента смеси, претерпевшего фазовый переход;  $r_i$  – удельная теплота, выделяемая (поглощаемая) при фазовом переходе (конденсации, абсорбции газов; кристаллизации, растворении; десорбции газов, парообразования, плавления и др.).

Уравнение для расчета значений  $\Delta h_0$  теплового эффекта химических превращений при стандартных условиях ( $T = 298$  К,  $p = 9,81$  Па):

$$\Delta h_0 = \sum v'_k \Delta H'_{0k} - \sum v''_k \Delta H''_{0k}, \quad (2.65)$$

где  $v_k$  – число молей  $k$ -го реагента в стехиометрическом уравнении;  $\Delta H'_{0k}$  ( $\Delta H''_{0k}$ ) – стандартные значения энталпии продуктов (исходных веществ);  $\Delta h_0$  – тепловой эффект.

Уравнение для расчета  $\Delta R$  – изменения теплового эффекта реакции от температуры:

$$\Delta h = \Delta h_0 + \int_{T_0}^T v \Delta c(T) dT, \quad (2.66)$$

где  $\Delta c(T)$  – изменение удельной теплоемкости реакционной смеси;  $T$  – теоретическая температура реакции;  $v$  – число молей реагентов.

При наличии в ХТС различных видов ТЭР вместо уравнений теплового баланса необходимо составлять уравнения энергетического баланса общего вида:

$$L_x + Q_x + H_x + \Theta_x = L_y + Q_y + H_y + \Theta_y, \quad (2.67)$$

где  $L$  – механическая энергия;  $Q$  – теплота;  $H$  – энергия потока рабочего тела;  $\dot{E}$  – электрическая энергия;  $x, y$  – индексы входного (выходного) потока энергии, включая фиктивные источники (стоки).

Энергетические балансы ХТС имеют существенные недостатки: в них не учитываются качественные различия ТЭР и особенности ХТП, обусловленные их необратимостью, и не учитываются внешние потери энергии; учитываются только внутренние потери энергии, а внешние потери – через кпд. Для преодоления недостатков энергетического баланса ХТС можно составить эксергетический баланс ХТС. Эксергетический баланс показывает потери от необратимости ХТП в системе и степень термодинамического совершенства рассматриваемой ХТС. Уравнение эксергетического баланса для элемента ХТС в общем случае имеет вид:

$$E_{\text{вх}} = E_{\text{вых}} + \Delta E_V + L + \tilde{E}, \quad (2.68)$$

где  $E_{\text{вх}}$  – эксергия на входе в элемент;  $E_{\text{вых}}$  – эксергия на выходе из элемента;  $\Delta E_V$  – изменение эксергии объема;  $L$  – работа, полученная или затраченная в элементе;  $\tilde{E}$  – потери эксергии в элементе.

Эксергия вещества в замкнутом объеме  $E_V$  характеризует закрытую термодинамическую систему. Задача определения эксергии  $E_V$  сводится к определению максимальной работы, которую может произвести термодинамическая система при переходе всех ее параметров к параметрам окружающей среды. При расчетах обычно определяется разность эксергии объема  $\Delta E_V$  в двух состояниях системы:

$$\Delta E_V = \Delta U - T_o = \Delta S + p_o = \Delta V,$$

где  $\Delta U$  – изменение внутренней энергии;  $\Delta S$  – изменение энтропии;  $\Delta V$  – изменение объема;  $T_o$  ( $p_o$ ) – температура (давление) окружающей среды.

Величина применима для изучения термодинамических систем, где совершаются процессы периодического характера. В теплообменных аппаратах объем потоков не изменяется, поэтому  $\Delta E_V = 0$ .

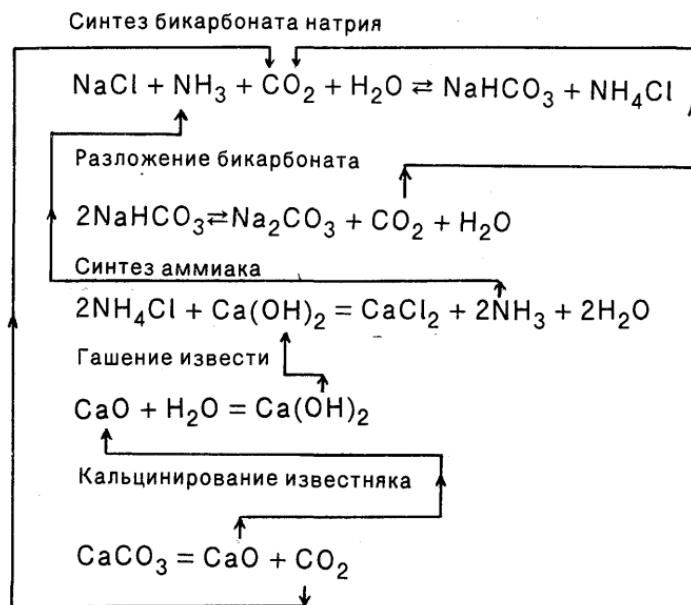
В обратимых ХТП потери эксергии равны нулю ( $\tilde{E} = 0$ ). Потери эксергии аналогичны величине энтропии, возрастающей в замкнутой системе также отражает потери от необратимости. Практическое преимущество понятия «эксергия» состоит в том, что уменьшение величины эксергии дает сразу величину потери превратимой, или работоспособной энергии (т. е. получают как абсолютную, так и относительную потерю).

Эксергетический кпд, который характеризует степень приближения данного ХТП к идеальному, для необратимых ХТП равен:

$$\eta_{ex} = (E_{\text{вых}} + L)/E_{\text{вх}} = (E_{\text{вх}} - \tilde{E})/E_{\text{вх}}. \quad (2.69)$$

Для каждой ХТС можно составить систему уравнений теоретического и технологического МТБ. Теоретический или стехиометрический баланс ХТС составляют на основе стехиометри-

ческих уравнений химических реакций, используя схему химического способа производства. Схема химического способа производства или химическая схема представляет собой взаимосвязанную совокупность основных и побочных химических реакций, протекающих при переработке сырья в необходимые продукты. Так, схема химического способа производства кальцинированной соды  $\text{Na}_2\text{CO}_3$  имеет следующий вид:



Технологический баланс ХС составляют с учетом всех отклонений от теоретически возможной глубины превращения вещества: состояния обратимости, не позволяющего из-за равновесия проводить превращение вещества до конца; невозможности достижения теоретической степени превращения вследствие ограничения скоростей химических реакций внешними факторами; влияния механизма превращения, в частности наличия побочных реакций, уменьшающих выход целевого продукта.

Рассмотрим пример составления стехиометрического баланса и определения степени превращения компонентов для химической реакции общего вида:

$$|v_a|A + |v_b|B + \dots + |v_i|I + |v_j|J + |v_k|K + \dots = |v_r|R + |v_s|S + \dots, \quad (2.70)$$

где  $v$  – стехиометрический коэффициент (для исходных веществ  $v < 0$ , для продуктов  $v > 0$ ;  $|v|$  – абсолютная величина).

Обозначим количество исходных веществ (в молях) до начала реакции  $n_{a0}, n_{b0}, \dots, n_{i0}$ , а количество исходных веществ в данный момент реакции  $n_a, n_b, \dots, n_i, \dots$

В реальных условиях соотношения количеств исходных веществ могут быть нестехиометрическими. Следовательно, расчет нужно вести по степени превращения произвольно выбранного исходного вещества  $K$

$$\chi_k = (n_{k0} - n_k) / n_{k0}.$$

В соответствии с уравнением (2.70), когда превращению подвергается 1 моль вещества  $K$ , одновременно превращению подвергается число молей исходного вещества  $I$ , равное

$$n_{i0} - n_i = (|v_i| / |v_k|) n_{k0} \chi_k.$$

Результаты расчета стехиометрического баланса для всех исходных веществ реакции (2.70) представлены в табл. 2.1.

Мгновенное значение концентрации исходного вещества  $J$  (мольной доли) равно отношению числа молей вещества  $J$ , содержащихся в данный момент в химическом процессе, к числу всех молей, находящихся в данный момент в процессе (сумма в четвертом столбце табл. 2.1.):

$$x_j = n_j / \sum n_j = [n_{j0} + (v_j / |v_k|) n_{k0} \chi_k] / [\sum n_{j0} + (\sum v_i / |v_k|) n_{k0} \chi_k]. \quad (2.71)$$

В числителе и знаменателе выражения (2.71) написан знак плюс, так как вместо  $|v_i|$  использовано  $v_i$  (для исходных веществ  $v_i < 0$ ).

Разделив числитель и знаменатель правой части уравнения (2.71) на сумму числа молей введенных исходных веществ  $\sum n_{i0}$  (сумма во втором столбце таблицы) и приняв во внимание, что

$$x_{j0} = n_{j0} / \sum n_{i0} \text{ или } x_{k0} = n_{k0} / \sum n_{i0},$$

получим зависимость мольной доли  $x_j$  исходного вещества от мольных долей компонентов исходной смеси:

$$x_j = [x_{j0} + (v_j / |v_k|) x_{k0} \chi_k] / [1 + (\sum v_i / |v_k|) x_{k0} \chi_k] \quad (2.72)$$

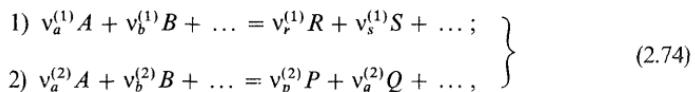
Таблица 2.1. Результаты расчета стехиометрического баланса

Исходное вещество	Введено, моль	Фактические стоки (источники), моль	Оставшееся мгновенное значение, моль
$A$	$n_{a0}$	$( v_a  /  v_k ) n_{k0} \chi_k$	$n_{a0} - ( v_a  /  v_k ) n_{k0} \chi_k$
$B$	$n_{b0}$	$( v_b  /  v_k ) n_{k0} \chi_k$	$n_{b0} - ( v_b  /  v_k ) n_{k0} \chi_k$
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$
$J$	$n_{j0}$	$( v_j  /  v_k ) n_{k0} \chi_k$	$n_{j0} - ( v_j  /  v_k ) n_{k0} \chi_k$
$K$	$n_{k0}$	$n_{k0} \chi_k$	$n_{k0} - n_{k0} \chi_k$
<b>Всего</b>	$\sum n_{i0}$	$\left[ (\sum  v_i ) /  v_k  \right] n_{k0} \chi_k$	$\sum n_{i0} - \left[ (\sum  v_i ) /  v_k  \right] n_{k0} \chi_k$

Когда известен состав исходной смеси, можно, используя уравнение (2.72), быстро рассчитать концентрацию каждого исходного вещества. Мольная доля  $x_j$  равна объемной доле, если в реакции участвуют газы, свойства которых близки к свойствам идеального газа; следовательно, в этом случае уравнение (2.72) можно использовать и для расчета объема реагирующих газов. Если известен состав смеси вводимых в реакцию исходных веществ и аналитически определена мольная доля одного из компонентов в некоторый момент времени, то можно рассчитать для этого момента значение степени превращения, отнесенной к указанному компоненту. После преобразования уравнения (2.72) степень превращения будет равна:

$$x_k = (x_{j0} - x_j) / (\Sigma v_i / |v_k|) x_{k0} x_j - (v_j / |v_k|) x_{k0}. \quad (2.73)$$

В случае одновременного протекания двух параллельных реакций, например,



аналогично уравнению (2.72) получают:

$$x_j = \frac{x_{j0} + (v_j^{(1)} / |v_k^{(1)}|) x_{k0} x_k^{(1)} + (v_j^{(2)} / |v_k^{(2)}|) x_{k0} x_k^{(2)} + \dots}{1 + (\Sigma v_i^{(1)} / |v_k^{(1)}|) x_{k0} x_k^{(1)} + (\Sigma v_i^{(2)} / |v_k^{(2)}|) x_{k0} x_k^{(2)} + \dots} \quad (2.75)$$

Рассмотрим частные случаи, для которых можно упростить уравнение (2.73):

- 1) если реагирующая смесь содержит компонент  $P$ , не участвующий в химическом превращении (например, катализаторы, растворители и т. д.), то  $v_p = 0$ ;
- 2) если реакция проходит без изменения числа молей, то  $\Sigma v_i = 0$ ;
- 3) если исходные вещества в реагирующей смеси содержатся в стехиометрических соотношениях, то  $x_j / x_k = v_j / v_k$ .

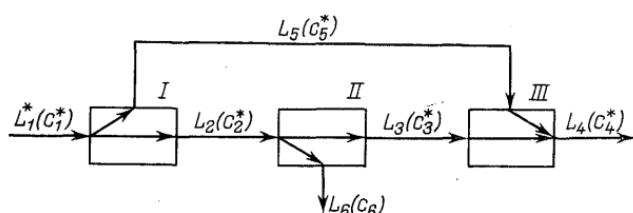


Рис. 2.9. Операторная схема XTC опреснения минерализованной артезианской воды:  
I – оператор разделения артезианской воды; II – осмотическая опреснительная установка; III – бак-водоприемник;  $c_i$  – концентрация минеральных солей в  $L_i$ -м потоке (индекс \* – соответствует свободным информационным переменным)

Пример 2.1. Данна ХТС опреснения минерализованной артезианской воды, обеспечивающая население питьевой водой. В структуру ХТС входит осмотическая опреснительная установка. Операторная схема ХТС (рис. 2.9) состоит из оператора физического разделения потока артезианской воды  $L_1$ , оператора диффузионного разделения  $L_2$ , соответствующего осмотической опреснительной установке, и оператора смещения  $L_3$ , соответствующего баку-водоприемнику.

Необходимо определить расход рассола, или минерализованной артезианской воды ( $L_2$ ) и концентрацию минеральных солей на выходе опреснительной установки  $c_6^*$ , если расход минерализованной воды на входе ХТС  $L_1^* = 10 \text{ л/с}$  с концентрацией солей  $c_1^* = 10 \cdot 10^3 \text{ мг/л}$  ( $c_1^* = c_2^* = c_3^*$ ), коэффициент разделения общих массовых расходов потоков в опреснительной установке  $\delta = L_6/L_2 = 0,25$ , концентрация солей в опресненной воде на выходе опреснительной установки  $c_5^* = 100 \text{ мг/л}$ , а концентрация солей в питьевой воде  $c_4^*$  должна быть равна 500 мг/л.

*Решение.* Для определения расхода рассола  $L_2$  и концентрации солей  $c_6^*$  составим следующую систему уравнений материального баланса ХТС. Уравнения балансов по общим массовым расходам физических потоков:

$$\begin{aligned} f_1: \quad & L_1^* - L_2 - L_5 = 0 \text{ (для оператора I);} \\ f_2: \quad & L_2 - L_3 - L_6 = 0 \text{ (для оператора II);} \\ -f_3: \quad & L_1^* - L_4 - L_6 = 0 \text{ (для ХТС в целом).} \end{aligned}$$

Уравнения балансов по массовым расходам минеральных солей:

$$\begin{aligned} f_4: \quad & c_2^* L_2 - c_3^* L_3 - c_6^* L_6 = 0 \text{ (для оператора II);} \\ f_5: \quad & c_3^* L_3 + c_5^* L_5 - c_4^* L_4 = 0 \text{ (для оператора III).} \end{aligned}$$

Уравнение физико-химических связей:

$$f_6: \quad L_3 = (1 - \delta)L_2 \text{ (для оператора II).}$$

Определяя значения  $L_3, L_5, L_4$  и  $L_6$  из уравнений  $f_6, f_1, f_3$  и  $f_2$ , соответственно, и подставляя их в уравнение  $f_5$ , получим:

$$L_2 = L_1^*(c_5^* - c_4^*)/(0,25c_4^* + c_5^* + 0,75c_3) = 10(10\,000 - 500)/(0,25 \cdot 500 + 10\,000 - 0,75 \cdot 100) = 9,45 \text{ л/с}$$

Зная  $L_2$ , из уравнений  $f_1, f_6, f_2, f_3$  и  $f_4$ , можно рассчитать  $L_5 = L_1 - L_2 = 0,55 \text{ л/с}$ ;  $L_3 = 0,75L_2 = 7,088 \text{ л/с}$ ;  $L_6 = L_2 - L_3 = 2,362 \text{ л/с}$ ;  $L_4 = L_1 - L_6 = 7,638 \text{ л/с}$ ;  $c_6^* = (L_2 c_2^* - L_3 c_3^*)/L_6 = 40,31 \text{ мг/л}$ .

Матрица Якоби системы уравнений  $f_1-f_6$  имеет следующий вид:

$$[J] = \begin{bmatrix} L_2 & L_3 & L_4 & L_5 & L_6 & c_6 \\ f_1 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ f_2 & 1 & -1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ f_3 & 0 & 0 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ f_4 & c_2^* & -c_3^* & 0 & 0 & -c_6 & -L_6 \\ f_5 & 0 & c_3^* & -c_4^* & c_5^* & 0 & 0 \\ f_6 & -(1-\delta) & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Коэффициент насыщенности матрицы Якоби

$$\beta_n = 1 - n_0/N = 1 - 20/36 = 1 - 20/36 = 0,44,$$

а коэффициент разреженности  $\beta_p = 1 - \beta_n = 0,56$ .

Результаты расчета СУ балансов ХТС представляют следующим образом: а) сводной таблицей материального и теп-

лового баланса; б) структурной схемой с таблицами покомпонентного состава ТП; в) структурной схемой с покомпонентным составом ТП; г) диаграммой балансов.

Сводная таблица баланса составляется таким образом, чтобы в левой половине таблицы были перечислены и просуммированы все поступающие количества (статьи прихода), а в правой половине таблицы перечисляют уходящие количества и их сумму (статьи расхода). В сводных таблицах проследить взаимосвязь материальных и тепловых нагрузок отдельных элементов и подсистем ХТС между собой очень трудно. Этот недостаток можно устранить, комбинируя набор таблиц и структурную схему ХТС. В центре чертежного листа располагают структурную схему ХТС, в левую часть листа в форме таблиц вписывают поступающие, а в правую – уходящие количества вещества и тепла.

Третья форма представления балансов состоит в свободном нанесении непосредственно на структурную схему ХТС (в некоторых случаях на технологическую схему) или в виде таблиц, или в виде набора значений параметров ТП. Такое представление весьма удобно, но имеет тот недостаток, что суммирование количеств и контроль полученных результатов чрезвычайно затруднены по сравнению с использованием сводных таблиц.

Диаграмма балансов ХТС – это модифицированная структурная схема ХТС, на которой каждый ТП изображают в виде некоторой полосы, отображающей в определенном масштабе величину массового или теплового расхода этого ТП. Диаграмму балансов составляют, как правило, на миллиметровой бумаге, строго соблюдая размеры полос. Диаграммы балансов хотя и дают наглядное представление о взаимосвязях материальных и тепловых нагрузок элементов ХТС, но их использование для представления результатов расчета балансов сложных ХТС весьма затруднительно.

## 2.7. ПОДГОТОВКА ИСХОДНЫХ ДАННЫХ ДЛЯ СОСТАВЛЕНИЯ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕПЛОВЫХ БАЛАНСОВ

Для составления систем уравнений МТБ (2.50)–(2.53) осуществляют предварительную подготовку исходных данных по изложенным ниже семи этапам.

1. Странят технологическую и структурную схемы ХТС с указанием всех известных массовых и тепловых расходов ТП.

2. Изучают физико-химическую сущность всех ХТП данной ХТС и принципы ее функционирования при заданных технологических условиях.

3. Составляют подробную спецификацию величин, отображающих переменные и параметры ХТС, заданные технологические условия и физико-химические константы, которые характеризуют

физико-химические свойства и состояния веществ, участвующих в ХТП. Вводят удобные символы для обозначения этих величин.

4. Определяют временной интервал расчета МТБ.

5. Выбирают вычислительный базис для решения системы уравнений МТБ. *Вычислительный базис* – это вид и размерность основной переменной системы уравнений МТБ, через значения которой будут выражены значения всех других переменных при расчете МТБ.

Рациональный выбор вычислительного базиса, который помогает исключить ошибки, легко контролировать правильность и сократить трудоемкость расчета МТБ, определяется физико-химическими особенностями веществ, перерабатываемых в ХТС. Если, например, химический состав входного потока ХТС неизвестен, что весьма характерно для такого природного сырья как древесина или уголь, то в качестве вычислительного базиса необходимо выбрать единицу массы этого сырья, или, если плотность неизвестна, то единицу объема. Для такого вида природного сырья никогда нельзя выбирать в качестве базиса 1 моль древесины или угля, поскольку неизвестны их молекулярные массы. Для реакторных ХТС обычно удобно выбрать в качестве вычислительного базиса формульную молекулярную массу одного из ТП, поскольку молекулы взаимодействуют между собой в простых кратных стехиометрических соотношениях.

Невозможно предложить общие правила по рациональному выбору вычислительного базиса для расчета МТБ. Рассмотрим некоторые основные рекомендации по рациональному выбору вычислительного базиса:

1) в качестве вычислительного базиса использовать ТП, о котором в ХТС больше всего сведений. Если, например, указан состав продуктов, а состав исходных реагентов неизвестен, то обычно целесообразно выбрать за вычислительный базис единицу массы или объема продукта, а расчет МТБ осуществлять в обратном порядке;

2) для жидкостных и твердых физико-химических систем всегда целесообразно выбирать массовый расход;

3) для газов, если задаются окружающие условия, целесообразно выбирать объемный расход.

Пример 2.2. Для полного сжигания пропана требуется 25% избытка воздуха:



Необходимо определить число молей воздуха, требуемого для получения 100 молей продуктов сжигания пропана (дымовых газов).

*Решение.* Возможны три варианта выбора вычислительного базиса при расчете материального баланса: 1) предполагаемое количество воздуха; 2) предполагаемое количество пропана; 3) предполагаемое количество дымовых газов. Это, однако, не будет рациональным выбором, так как состав дымовых газов неизвестен.

Таблица 2.2. Результаты расчета материального баланса  
(вычислительный базис – 1 моль пропана)

Вход						Выход (дымовые газы)					
состав	H	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	C	моли	состав	H	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	C	моли
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	8,0			3,0	1,0	CO <sub>2</sub>			3,0	3,0	3,0
Воздух		23,5	6,25		29,75	H <sub>2</sub> O	8,0		2,0	4,0	
						O <sub>2</sub>			1,25		1,25
Итого:	8,0	23,5	6,25	3,0	30,75	N <sub>2</sub>		23,5			23,5
						Итого:	8,0	23,5	6,25	3,0	31,75

Для определения рационального вычислительного базиса решим задачу с каждым из трех приведенных базисов.

**Вариант 1.** Вычислительный базис – 1 моль пропана.

Количество молей кислорода, необходимое для реакции горения, равно пяти; общее количество молей кислорода с учетом 25% избытка ( $1,25 \times 5$ ) = 6,25. Общее количество молей воздуха (предполагается, что содержание кислорода в воздухе равно 21%) =  $6,25/0,21 = 29,75$ . Количество молей азота составляет 23,50.

Результаты расчета материального баланса представлены в табл. 2.2.

Теперь можно рассчитать требуемое количество воздуха для получения 100 молей дымовых газов  $G_b$ :

$$G_b = (100 \text{ молей газов}) \times (29,75 \text{ молей воздуха}) / (31,75 \text{ молей газов}) = 93,7 \text{ молей воздуха.}$$

**Вариант 2.** Вычислительный базис – 1 моль воздуха. Принимая во внимание избыток требуемого воздуха, количество молей пропана равно  $(1/5) \times (0,21)/1,25 = 0,0336$ . Результаты расчета материального баланса приведены в табл. 2.3.

Определим количество молей воздуха, необходимое для получения 100 молей дымовых газов

$$G_b = (100 \text{ молей газов}) \times (1 \text{ моль воздуха}) / (1,068 \text{ молей газов}) = 93,7 \text{ молей воздуха.}$$

**Вариант 3.** Вычислительный базис – 100 молей дымовых газов. Введем обозначения для состава дымовых газов:  $N$  – моли азота;  $O$  – моли кислорода;  $P$  – моли CO<sub>2</sub>;  $Q$  – моли H<sub>2</sub>O; для состава входного потока:  $A$  – моли воздуха;  $B$  – моли пропана.

Могут быть составлены следующие уравнения материальных балансов по расходу химических компонентов:

$$\text{Баланс C: } 3B = P; \quad (2)$$

$$\text{Баланс H}_2: \quad 4B = Q; \quad (3)$$

$$\text{Баланс O}_2: \quad 0,21A = O + Q/2 + P; \quad (4)$$

$$\text{Баланс N}_2: \quad 0,79A = N. \quad (5)$$

Кроме этого, запишем уравнение, вытекающее из выбора вычислительного базиса:

$$N + O + P + Q = 100. \quad (6)$$

Избыток требуемого воздуха равен

$$(0,21A) \times (0,2) = 0. \quad (7)$$

Стехиометрическое соотношение между реагентами (1):

$$(0,21A) = 5B(1,25); \quad (8) \qquad 4P = 3Q. \quad (9)$$

Таблица 2.3. Результаты расчета материального баланса (вычислительный базис – 1 моль воздуха)

Вход						Выход (дымовые газы)					
состав	H	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	C	моли	состав	H	N <sub>2</sub>	O <sub>2</sub>	C	моли
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	0,269			0,101	0,0336	CO <sub>2</sub>			0,101	0,101	0,101
Воздух	0,79	0,21			1,0	H <sub>2</sub> O	0,269		0,067		0,135
						O <sub>2</sub>			0,042		0,042
Итого:	0,269	0,79	0,21	0,101	1,0336	N <sub>2</sub>		0,79			0,79
						Итого:	0,269	0,79	0,210	0,101	1,068

Материальный баланс по общим массовым расходам:

$$44P + 18Q + 32O + 28N = 29A + 44B. \quad (10)$$

Баланс по расходу воздуха:

$$A = N + O + P + Q/2. \quad (11)$$

Таким образом, составлены  $N = 10$  линейных уравнений (2)–(11), включающие  $M = 6$  неизвестных ( $A, B, N, O, P$  и  $Q$ ). Определим независимость этих десяти уравнений. Для этого указанные уравнения запишем в матричной форме (табл. 2.4), где каждому уравнению соответствует столбец. Составленная матрица системы уравнений имеет размерность  $(7 \times 10)$ .

С использованием методов линейной алгебры найдено, что имеются семь линейно независимых столбцов (включая столбец 9), как показано в табл. 2.4.

Так как имеются  $N_1 = 7$  независимых уравнений с  $M = 6$  неизвестными переменными, то эти уравнения должны быть несовместимыми. Возникшая ситуация обусловлена тем, что при записи уравнения (10) допущена некоррект-

Таблица 2.4. Результаты расчета материального баланса для матричной формы системы уравнений (2)–(11)

Наименование неизвестных	Номера уравнений материального баланса										Решение
	(2)	(3)	(4)	(5)	(6)	(7)	(8)	(9)	(10)	(11)	
A	0	0	0,21	0,79	0	0,042	0,21	0	-29,0*	1	93,70
B	3	4	0	0	0	0	-6,25	0	-44,0	0	3,148
N	0	0	0	-1	1	0	0	0	28,0	-1	74,02
O	0	0	-1	0	1	-1	0	0	32,0	-1	3,935
P	-1	0	-1	0	1	0	0	4	44,0	-1	9,445
Q	0	-1	-0,5	0	1	0	0	-3	18,0	-0,5	12,59
Свободный член	0	0	0	0	100	0	0	0	0	0	0
Линейная независимость уравнений	Да	Да	Да	Да	Да	Да	Нет	Нет	Нет	Нет	

\* Если вместо значения 29,0 используется 28,84.

ность в определении молекулярной массы воздуха. Основываясь на составе 21%  $O_2$  и 79%  $N_2$ , получим уточненное значение молекулярной массы воздуха:

$$0,79 \times (28) + 0,21 \times (32) = 28,84. \quad (12)$$

Если подставить это значение в (10), то можно установить, что уравнение (10) избыточно. Следовательно, можно найти однозначное решение системы уравнений  $N = 6$  с  $M = 6$  неизвестными. Результаты решений приведены в последнем столбце табл. 2.4.

Очевидно, что третий вариант расчета материальных балансов при вычислительном базисе 100 моль дымовых газов, хотя он избегает операций преобразования всех ТП к выбранному базису, является значительно более трудоемким по сравнению с первым и вторым вариантами выбора вычислительного базиса.

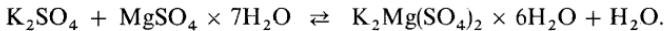
6. Определяют сквозное, или связующее вещество в технологических потоках ХТС. *Сквозное, или связующее вещество* – это химический элемент, частица или вещество, которые проходят через ТП системы не изменяясь. В качестве сквозного вещества часто выбирают воздух, воду или инертный газ.

Если смесь реагентов содержит известное количество инертного компонента, не участвующего в химической реакции (например, растворитель, катализатор, инертный газ, нереагирующее вещество, представляющее собой примесь исходного сырья и т. д.), то очень часто можно отнести количество исходных веществ и целевых продуктов к количеству этого компонента и быстро рассчитать, например, выход, без составления полного баланса.

Такой метод особенно удобен при необходимости расчета балансов действующих ХТС, когда точные измерения количеств реагирующих веществ и продуктов иногда затруднены или даже невозможны. В этом случае в реакционную смесь вводят известное количество инертного компонента – трассера (например, радиоактивного изотопа), концентрацию которого определить несложно, и на основе анализа смесей перед реакцией и после нее рассчитывают степень превращения, выход, производительность.

Метод сквозного вещества в общем случае поясняют стехиометрические уравнения (2.72)–(2.75).

Пример 2.3. Рассматривается ХТП выпаривания водного раствора сульфатов калия и магния ( $MgSO_4$  в растворе находится в избытке по отношению к  $K_2SO_4$ ), из раствора которого осаждается кристаллогидрат – шенит:



Перед выпариванием в раствор введено 0,1 кг инертного компонента  $J$ . Анализы дали следующие результаты: перед выпариванием в растворе содержится 12,8%  $K_2SO_4$  и 0,0542%  $J$ , а после кристаллизации шенита 4,09%  $K_2SO_4$  и 0,662  $J$ . Необходимо определить: 1) количество раствора перед выпариванием и после кристаллизации шенита; 2) выход процесса выделения  $K_2SO_4$  из раствора; 3) количества полученного шенита и выпаренной воды.

*Решение 1.* Расчет количества раствора облегчается тем, что количество инертного компонента  $J$  в растворе не изменяется. Перед выпариванием количество раствора равно

$$M_p = 0,1 \times 100 / 0,0542 = 184,5 \text{ кг},$$

а после выпаривания и кристаллизации шенита количество раствора равно:

$$m_p = 0,1 \times 100/0,662 = 15,1 \text{ кг.}$$

2. В 100 кг раствора перед выпариванием содержится 12,80 кг  $\text{K}_2\text{SO}_4$ , а после выпаривания 4,09 кг  $\text{K}_2\text{SO}_4$ . Количество раствора вследствие выпаривания и кристаллизации шенита изменяется обратно пропорционально содержанию ионного компонента  $J$ : таким образом из 100 кг исходного раствора в конечном растворе остается следующее количество  $\text{K}_2\text{SO}_4$ , кг :

$$4,09 \times 0,0542/0,662 = 0,33.$$

Выход процесса выделения  $\text{K}_2\text{SO}_4$  равен, %:

$$[(12,80 - 0,33)/12,80] \times 100 = 97,4.$$

3. Относительные молекулярные массы:  $\text{K}_2\text{SO}_4$  равна 174,2, а шенита 402,6. Количество полученного шенита равно:

$$(184,5/100) \times 12,8 \times 0,974(402,6/174,2) = 53,3 \text{ кг.}$$

Количество выпаренной воды равно:

$$184,5 - 53,3 - 15,1 = 116,1 \text{ кг.}$$

7. Определяют границы фрагмента структуры ХТС (элемент, подсистема, система в целом), для которого составляется система уравнений МТБ (2.50)–(2.53). При составлении уравнений МТБ целесообразно каждый раз выбирать такой фрагмент структуры ХТС, через который проходит только один ТП с неизвестными значениями массовых и тепловых расходов.

## 2.8 ПРИЗНАКИ СУЩЕСТВОВАНИЯ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕПЛОВЫХ БАЛАНСОВ

Систему уравнений МТБ (2.50)–(2.52), составленную для элемента (подсистемы или ХТС), можно рассматривать как совокупность неявных функций ( $\varphi_i; i = 1, n$ ) от  $m$  переменных ( $x_j, j = 1, m, m \geq n$ ):

$$\left\{ \begin{array}{l} \varphi_1(x_1, x_2, \dots, x_m) = 0; \\ \varphi_2(x_1, x_2, \dots, x_m) = 0; \\ \dots \dots \dots \\ \varphi_n(x_1, x_2, \dots, x_m) = 0. \end{array} \right. \quad (2.76)$$

Напомним, что система уравнений называется совместной, если она имеет хотя бы одно решение. Совместная система уравнений определена, если она имеет единственное решение, и неопределенна, если она имеет бесконечное множество решений.

Чтобы система уравнений МТБ (2.76) имела решение, все функции  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ , определенные при всех значениях  $x_1, x_2, \dots, x_m$  должны быть функционально независимы.

Функции  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$  называют функционально зависимыми, если хотя бы одна из них представляет собой некоторую функциональную зависимость от остальных функций, т. е.

$$\varphi_i = F(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{i-1}, \varphi_{i+1}, \dots, \varphi_n). \quad (2.77)$$

Если тождество (2.77) для данного набора функций (2.76) не выполняется, то функции  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$  называют функционально независимыми.

Из теории функционального анализа известно, что функции  $\varphi_1, \dots, \varphi_n$  функционально независимы, а переменные  $x_1, \dots, x_n$  будут определены однозначно из (2.76) при известных ( $m - n$ ) переменных  $x_{n+1}, \dots, x_m$ , если якобиан, или функциональный определитель этой совокупности функций (2.76) отличен от нуля:

$$\det [J] = \det [\partial \varphi_i / \partial x_j] \neq 0 \quad (i = \overline{1, n}; j = \overline{1, m}, \quad m \geq n), \quad (2.78)$$

где  $[J]$  – функциональная матрица Якоби.

В случае, когда каждая из неявных функций  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$  является линейной функцией, определенной при всех значениях  $x_1, x_2, \dots, x_n$ , функции линейно независимы, если

$$\left. \begin{array}{l} \text{из того, что} \quad \sum_{i=1}^n \lambda_i \varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \text{при всех значениях} \quad x_1, x_2, \dots, x_n, \text{ следует,} \\ \text{что} \quad \lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_n = 0 \end{array} \right\} \quad (2.79)$$

В противном случае эти  $n$  функций, или уравнений линейно зависимы, т.е. по крайней мере одна из функций, например  $\varphi_1$ , может быть представлена как линейная комбинация остальных с некоторыми числовыми коэффициентами:

$$\varphi_1 = -(\lambda_2 / \lambda_1) \varphi_2 + \dots - (\lambda_n / \lambda_1) \varphi_n. \quad (2.80)$$

Для определения линейно независимых уравнений  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$  (2.76) можно применить метод, основанный на построении определителя Грама для  $n$  векторов, который составлен из попарных скалярных произведений этих векторов  $\Gamma = \Gamma(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n) = \det [(\varphi_i, \varphi_k)], i, k = \overline{1, n}$ , где  $\varphi_i$  – вектор, соответствующий левой части выражения (2.76). Так, для трех векторов  $(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3)$  определитель Грама равен:

$$\Gamma = \Gamma(\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3) = \begin{bmatrix} \varphi_1 \varphi_1 & \varphi_1 \varphi_2 & \varphi_1 \varphi_3 \\ \varphi_2 \varphi_1 & \varphi_2 \varphi_2 & \varphi_2 \varphi_3 \\ \varphi_3 \varphi_1 & \varphi_3 \varphi_2 & \varphi_3 \varphi_3 \end{bmatrix}$$

Из линейной алгебры известно, что  $n$  векторов  $(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n)$  пространства  $U$  линейно независимы в том и только том случае, если определитель Грама  $n$ -го порядка отличен от нуля:

$$\Gamma(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n) = \det [(\varphi_i, \varphi_k)] \neq 0. \quad (2.81)$$

Системы уравнений МТБ всегда содержат число уравнений  $n \leq m$ , где  $m$  – число переменных, поэтому эти системы уравнений имеют в математическом аспекте бесконечно много ненулевых

или нетривиальных решений. Однако в технологическом и физико-химическом отношении это число ненулевых решений всегда конечно. Каждое ненулевое решение системы уравнений МТБ должно удовлетворять необходимым физико-химическим и технологическим условиям функционирования ХТС.

Для определения независимости уравнений и совместности системы уравнений МТБ необходимо рассматривать соответствующую данной системе уравнений функциональную матрицу Якоби.

В качестве признака существования и единственности решения системы уравнений (2.76) рассматривают значение ранга  $r$  матрицы  $[J]$  ( $i = 1, n; j = 1 m; m > n$ ): если  $r = n$ , то система уравнений состоит из  $n$  независимых уравнений и является совместной; если  $r < n$ , то система уравнений балансов состоит из  $r$  независимых уравнений, а  $(n - r)$  уравнений зависят от других  $r$  уравнений, и система уравнений является совместной. Ненулевые решения системы уравнений МТБ (2.76) определяют, исходя из выбора  $r$ -го числа уравнений с  $r$  неизвестными, для которых функциональный определитель, или якобиан отличен от нуля, т. е. справедливо соотношение (2.78). При выполнении соотношения (2.78) рассматривают систему  $r$  уравнений с  $r$  неизвестными, которые оказываются выражеными через  $(m - r)$  остальных переменных  $x_{r+1}, x_{r+2}, \dots, x_m$ . Переменные  $x_{r+1}, x_{r+2}, \dots, x_m$  называют свободными. Все свободные переменные системы уравнений балансов должны быть независимыми одна от другой и соответствовать физико-химическим и технологическим условиям функционирования.

Если система уравнений МТБ является линейной, то функциональную матрицу Якоби можно не составлять, так как в этом случае она совпадает с матрицей системы линейных уравнений (СЛУ). Признаки существования и единственности решения СЛУ сформулированы в известных теоремах линейной алгебры.

При составлении системы независимых уравнений МТБ необходимо учитывать, что для любого элемента ХТС баланс по общим массовым расходам (2.50) равен сумме балансов по массовым расходам всех компонентов (2.51). В отсутствие в ХТС химических превращений составление элементных балансов излишне, так как элементные балансы содержатся в покомпонентных балансах. Для каждого элемента, подсистемы или ХТС в целом в общем случае можно составить несколько вариантов систем независимых уравнений материальных балансов.

Поскольку для любой ХТС при составлении систем уравнений МТБ можно выбирать различные вычислительные базисы, выделять различные фрагменты структуры и выбирать различные наборы независимых уравнений, задача составления систем уравнений МТБ является многовариантной, т. е. для любой ХТС можно составить множество эквивалентных систем уравнений

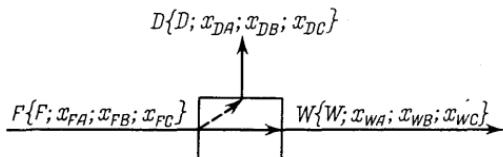


Рис. 2.10. Технологический оператор разделения:

$F, x_{F_A}, x_{F_B}, x_{F_C}$  – массовый расход и состав (в мол. долях) питания;  $D, x_{D_A}, x_{D_B}, x_{D_C}$  – массовый расход и состав (в мол. долях) дистиллята;  $W, x_{W_A}, x_{W_B}, x_{W_C}$  – массовый расход и состав (в мол. долях) кубового остатка

**МТБ.** Напомним, что две системы уравнений называются эквивалентными, если решение одной системы уравнений является решением другой системы уравнений, и наоборот.

**Пример 2.4.** Для ТО разделения смеси углеводородов – метана (*A*), этана (*B*) и пропана (*C*) (рис. 2.10) необходимо составить несколько эквивалентных систем независимых уравнений материальных балансов (МБ). Поток питания *F* на входе ТО содержит  $x_{F_A}$  мольных долей метана,  $x_{F_B}$  – мольных долей этана и  $x_{F_C}$  – мольных долей пропана. Выходные потоки дистиллята *D* и кубового остатка *W* также содержат метан, этан и пропан. *F*, *D* и *W* обозначают массовые расходы ТП в молях.

**Решение.** Для рассматриваемого ТО разделения можно записать три вида уравнений материального баланса (МБ): по общим массовым расходам физических потоков (2.50), по массовым расходам химических компонентов (веществ) – (2.51) и по массовым расходам химических элементов (углерод и водород).

Уравнение баланса по общим массовым расходам физических потоков:

$$F - D - W = 0. \quad (1)$$

Уравнения балансов по массовым расходам химических компонентов: баланс метана  $\text{CH}_4$  (*A*)

$$Fx_{F_A} - Dx_{D_A} - Wx_{W_A} = 0; \quad (2)$$

баланс этана  $\text{C}_2\text{H}_6$  (*B*)

$$Fx_{F_B} - Dx_{D_B} - Wx_{W_B} = 0; \quad (3)$$

баланс пропана  $\text{C}_3\text{H}_8$  (*C*)

$$Fx_{F_C} - Dx_{D_C} - Wx_{W_C} = 0. \quad (4)$$

УФХС, которое отображает мольный состав физических потоков:

$$x_{F_A} + x_{F_B} + x_{F_C} = 1; \quad (5)$$

$$x_{D_A} + x_{D_B} + x_{D_C} = 1; \quad (6)$$

$$x_{W_A} + x_{W_B} + x_{W_C} = 1. \quad (7)$$

Уравнения баланса массовых расходов химических элементов: баланс углерода

$$Fx_{F_A}(1) + Fx_{F_B}(2) + Fx_{F_C}(3) - Dx_{D_A}(1) - Dx_{D_B}(2) - Dx_{D_C}(3) - Wx_{W_A}(1) - Wx_{W_B}(2) - Wx_{W_C}(3) = 0; \quad (8)$$

баланс водорода

$$Fx_{F_A}(4) + Fx_{F_B}(6) + Fx_{F_C}(8) - Dx_{D_A}(4) - Dx_{D_B}(6) - Dx_{D_C}(8) - Wx_{W_A}(4) - Wx_{W_B}(6) - Wx_{W_C}(8) = 0. \quad (9)$$

Уравнения (1)–(9) представляют собой систему уравнений материальных балансов из  $n = 9$  уравнений с  $m = 12$  неизвестными:  $F; D; W; x_{F_A}; x_{F_B}; x_{F_C}; x_{D_A}; x_{D_B}; x_{D_C}; x_{W_A}; x_{W_B}; x_{W_C}$ .

В этой системе уравнений независимыми являются, например, уравнения: (1)–(6); (2)–(7); (1), (3)–(7). Зависимость уравнений СУ балансов (1)–(9) вытекает из следующих соотношений, которые справедливы для некоторых уравнений, а именно:

$$(8) = 1(2) + 2(3) + 3(4); \quad (9) = 4(2) + 6(3) + 8(4); \\ (1) = (2) + (3) + (4) + (5) + (6) + (7).$$

Таким образом, система уравнений материального баланса ТО разделения содержит  $n = 6$  независимых уравнений с  $m = 12$  неизвестными, т. е. данная система уравнений имеет  $m - n = 6$  свободных переменных.

**Пример 2.5.** Для ТО разделения смеси углеводородов (см. рис. 2.10) необходимо проанализировать влияние выбора набора свободных переменных системы уравнений МБ на характер решения системы уравнений (совместность, определенность и неопределенность системы уравнений).

**Решение. Вариант 1.** Допустим, что в качестве набора свободных переменных выбраны  $F = 100$  кмоль/ч,  $D = 75$  кмоль/ч, концентрации компонентов в мольных долях  $x_{F_A} = 0,740$ ,  $x_{F_B} = 0,200$ ,  $x_{D_A} = 0,9733$ ,  $x_{D_B} = 0,020$ . Необходимо определить следующие переменные:  $W; x_{F_C}; x_{D_C}; x_{W_A}; x_{W_B}; x_{W_C}$ .

Для определения численных значений этих шести неизвестных рассмотрим СЛУ материального баланса, включающую независимые уравнения (1)–(6). Решая эту СЛУ, получаем, кмоль/ч:

$$W = F - D = 25;$$

$$x_{F_C} = 1 - x_{F_A} - x_{F_B} = 0,060;$$

$$x_{D_C} = 1 - x_{D_A} - x_{D_B} = 0,0067;$$

$$x_{W_A} = (Fx_{F_A} - Dx_{D_A})/W = 0,040;$$

$$x_{W_B} = (Fx_{F_B} - Dx_{D_B})/W = 0,740;$$

$$x_{W_C} = (Fx_{F_C} - Dx_{D_C})/W = 0,22.$$

При заданном наборе свободных переменных СЛУ (1)–(6) оказалась совместной и определенной.

**Вариант 2.** В качестве свободных переменных заданы:  $F = 100$  кмоль/ч,  $D = 75$  кмоль/ч,  $W = 25$  кмоль/ч,  $x_{F_A} = 0,740$ ,  $x_{D_A} = 0,9733$ ,  $x_{W_A} = 0,040$ . Необходимо определить:  $x_{F_B}; x_{D_B}; x_{D_C}; x_{F_C}; x_{W_B}; x_{W_C}$ .

При данном наборе свободных переменных СЛУ (1)–(6) несовместна. Это обусловлено тем фактором, что только лишь пять свободных переменных являются независимыми, ибо  $W = F - D$ . В этом случае имеем только пять независимых уравнений в системе уравнений (2)–(6) с шестью неизвестными  $x_{F_B}$ ,  $x_{D_B}$ ,  $x_{F_C}$ ,  $x_{D_C}$ ,  $x_{W_B}$ ,  $x_{W_C}$ .

**Вариант 3.** Задан набор свободных переменных:  $F = 100$  кмоль/ч,  $D = 70$  кмоль/ч,  $x_{F_A} = 0,70$ ,  $x_{F_B} = 0,20$ ,  $x_{D_B} = 0,01$ ,  $x_{W_B} = 0,70$ ,  $x_{W_C} = 0,15$ . Необходимо найти значения переменных:  $W, x_{F_C}, x_{D_C}, x_{W_A}, x_{W_C}$ .

Решением (1) – (2) и (5) – (7) получают:

$$W = F - D = 30;$$

$$x_{F_C} = 1 - x_{F_A} - x_{F_B} = 0,1;$$

$$x_{W_A} = 1 - x_{W_B} - x_{W_C} = 0,15;$$

$$x_{D_A} = (Fx_{F_A} - Wx_{W_A})/D = 0,935;$$

$$x_{D_C} = 1 - x_{D_A} - x_{D_B} = 0,055.$$

Кажется, что получено решение системы уравнений материального баланса ТО разделения. Однако проверим истинность этого решения подстановкой в уравнение (3), которое не было использовано из-за избытка свободных переменных:

$$Fx_{F_B} = Dx_{D_B} + Wx_{W_B} = 70 \times 0,01 + 30 \times 0,7 = 21,7 \neq 100 \cdot 0,2.$$

Ошибка в решении можно было уже заметить из того факта, что  $x_{D_C} > x_{D_B}$  и  $x_{W_A} = x_{W_C}$ . Таким образом, рассматриваемая СУ несовместна, так как имеет  $n=6$  уравнений с  $m=5$  неизвестными. Это получилось в результате излишка исходных данных по сравнению с требуемым числом независимых свободных переменных и некорректности задания некоторых исходных данных.

Рассмотренная в этом примере ситуация является типичной для решения практических задач проектирования и эксплуатации ХТС, когда число исходных данных больше, чем число независимых уравнений ММ системы.

Пример 2.6. Для одноконтурной ХТС, состоящей из совокупности трех ТО (рис. 2.11), определить независимые уравнения МБ по массовым расходам компонентов  $A$  и  $B$ , которые имеют следующий вид:

баланс для ТО смешения I

$$Fx_{F_A} + D_2x_{D_2A} - F_1x_{F_1A} = 0; \quad (1)$$

$$Fx_{F_B} + D_2x_{D_2B} - F_1x_{F_1B} = 0; \quad (2)$$

баланс для ТО разделения II

$$F_1x_{F_1A} - D_1x_{D_1A} - W_1x_{W_1A} = 0; \quad (3)$$

$$F_1x_{F_1B} - D_1x_{D_1B} - W_1x_{W_1B} = 0; \quad (4)$$

баланс для ТО разделения III

$$W_1x_{W_1A} - D_2x_{D_2A} - W_2x_{W_2A} = 0; \quad (5)$$

$$W_1x_{W_1B} - D_2x_{D_2B} - W_2x_{W_2B} = 0; \quad (6)$$

баланс для ХТС в целом

$$Fx_{F_A} - D_1x_{D_1A} - W_2x_{W_2A} = 0; \quad (7)$$

$$Fx_{F_B} - D_1x_{D_1B} - W_2x_{W_2B} = 0. \quad (8)$$

Функциональная матрица Якоби для системы уравнений (1)–(8) имеет вид:

$$\begin{matrix} \frac{\partial \psi_i}{\partial F} & \frac{\partial \psi_i}{\partial D_2} & \frac{\partial \psi_i}{\partial F_1} & \frac{\partial \psi_i}{\partial D_1} & \frac{\partial \psi_i}{\partial W_1} & \dots & \frac{\partial \psi_i}{\partial x_{W_1A}} & \frac{\partial \psi_i}{\partial x_{W_1B}} & \frac{\partial \psi_i}{\partial x_{W_2A}} & \frac{\partial \psi_i}{\partial x_{W_2B}} \end{matrix}$$

$$[J] = \begin{pmatrix} (1) & x_{F_A} & x_{D_2A} & -x_{F_1A} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ (2) & x_{F_B} & x_{D_2B} & -x_{F_1B} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ (3) & 0 & 0 & x_{F_1A} & -x_{D_1A} & -x_{W_1A} & -W_1 & 0 & 0 & 0 \\ (4) & 0 & 0 & x_{F_1B} & -x_{D_1B} & -x_{W_2B} & 0 & -W_1 & 0 & 0 \\ (5) & 0 & -x_{D_2A} & 0 & 0 & x_{W_1A} & W_1 & 0 & -W_2 & 0 \\ (6) & 0 & -x_{D_2B} & 0 & 0 & x_{W_1B} & 0 & W_1 & 0 & -W_2 \\ (7) & x_{F_A} & 0 & 0 & -x_{D_1A} & 0 & 0 & 0 & -W_2 & 0 \\ (8) & x_{F_B} & 0 & 0 & -x_{D_1B} & 0 & 0 & 0 & 0 & -W_2 \end{pmatrix}$$

Из рассмотрения матрицы  $[J]$  (9) очевидно, что ее ранг  $r = 6$ , так как строки 7 и 8 представляют собой линейные комбинации трех строк соответственно: (7) =

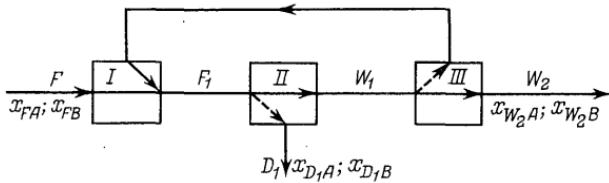


Рис. 2.11. Простая одноконтурная ХТС:

I – оператор смещения; II и III – операторы разделения;  $F, F_1, D_1, D_2, W_1, W_2$  – массовые расходы физических потоков;  $x_{F_A}, x_{F_B}$  – состав входного потока;  $x_{D_1A}, x_{D_1B}$  и  $x_{W_2A}, x_{W_2B}$  – составы выходных потоков

$= (1) + (3) + (5)$  и  $(8) = (2) + (4) + (6)$ . Независимыми уравнениями в данной системе уравнений (1)–(8) являются, например, два набора уравнений: (1)–(6) или (1)–(5) и (8).

Пример 2.7. Одноконтурная ХТС производства 1,2-дихлорэтана (рис. 2.12) состоит из смесителей I и II, реактора III, колонны ректификации IV и механического разделителя технологического потока без изменения концентраций. В реакторе протекает реакция:  $C_2H_4 + Cl_2 \rightarrow C_2H_4Cl_2$ . Введем обозначения химических компонентов  $Cl_2$  – 1,  $C_2H_4$  – 2,  $C_2H_4Cl_2$  – 3. Номера технологических потоков 1–9 указаны на операторной схеме (рис. 2.12).

Входной технологический поток ХТС (ТП-1) содержит 100 молей  $Cl_2$ , а входной ТП-2 содержит 100 молей  $C_2H_4$ . Степень превращения этилена в реакторе  $\kappa = 0,9$ . Выходной поток реактора (ТП-5) разделяется в колонне ректификации таким образом, что поток дистиллята (ТП-6) содержит 99,9%  $Cl_2$ , 8%  $C_2H_4$  и 2%  $C_2H_4Cl_2$  от количества соответствующих химических компонентов в потоке питания колонны ТП-5. На выходе разделителя 5% от общего массового расхода дистиллята (ТП-6) сбрасывается в атмосферу (ТП-7).

Необходимо определить количество хлора в обратном ТП (ТП-8) и количество 1,2-дихлорэтана в кубовом остатке колонны ректификации (ТП-9).

Решение. При составлении СУ материального баланса данной ХТС массовый расход каждого химического компонента будем измерять в молях, введя следующее обозначение:  $n_{ij}$  – число молей  $i$ -го химического компонента ( $i = 1, 3$ ) в  $j$ -м ТП ( $j = 1, 9$ ).

Поскольку в каждом из пяти элементов ХТС осуществляется физико-химическое преобразование трех химических компонентов, можно составить  $N = 15$  уравнений МБ по массовым расходам химических компонентов:

смеситель I

$$f_1: n_{11} + n_{18} = n_{13} \quad (\text{баланс хлора}); \quad f_2: n_{21} + n_{28} = n_{23}$$

$$(\text{баланс этилена}); \quad f_3: n_{31} + n_{38} = n_{33} \quad (\text{баланс 1,2-дихлорэтана});$$

смеситель II

$$f_4: n_{12} + n_{13} = n_{14}; \quad f_5: n_{22} + n_{23} = n_{24}; \quad f_6: n_{32} + n_{33} = n_{34};$$

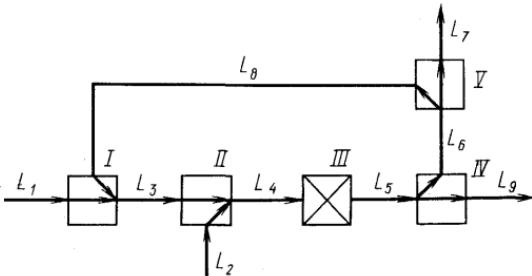


Рис. 2.12. Операторная схема одноконтурной ХТС производства 1,2-дихлорэтана ( $L_1$ – $L_9$  – обозначения технологических потоков)

### реактор III

$f_7: n_{14} - n_{1,10}^* = n_5$ , где  $n_{1,10}^*$  – фиктивный сток хлора;

$f_8: n_{24} - n_{2,10}^* = n_{25}$ , где  $n_{2,10}^*$  – фиктивный сток этилена;

$f_9: n_{34} + n_{3,10}^* = n_{35}$ , где  $n_{3,10}^*$  – фиктивный источник  $\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$ ;

### ректификационная колонна IV

$f_{10}: n_{15} = n_{19} + n_{16}$ ;  $f_{11}: n_{25} = n_{29} + n_{26}$ ;  $f_{12}: n_{35} = n_{39} + n_{36}$ ;

### разделитель V

$f_{13}: n_{16} = n_{17} + n_{18}$ ;  $f_{14}: n_{26} = n_{27} + n_{28}$ ;  $f_{15}: n_{36} = n_{37} + n_{38}$ .

Исходя из условия задачи, составим следующие 15 уравнений физико-химических связей:

### мольный состав ТП-1

$f_{16}: n_{11} = 100$ ;  $f_{17}: n_{21} = 0$ ;  $f_{18}: n_{31} = 0$ ;

### мольный состав ТП-2

$f_{19}: n_{12} = 0$ ;  $f_{20}: n_{22} = 100$ ;  $f_{21}: n_{32} = 0$ ;

### количество этилена на выходе реактора III

$f_{22}: n_{25} = (1 - 0,9)n_{24}$ ;

### количество хлора, этилена и 1,2-дихлорэтана в дистилляте:

$f_{23}: n_{16} = 0,999n_{15}$ ;  $f_{24}: n_{26} = 0,08n_{25}$ ;  $f_{25}: n_{36} = 0,02n_{35}$ ;

### количество $\text{Cl}_2$ , $\text{C}_2\text{H}_4$ и $\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$ , соответственно сбрасываемых в атмосферу

$f_{26}: n_{17} = 0,05n_{16}$ ;  $f_{27}: n_{27} = 0,05n_{26}$ ;  $f_{28}: n_{37} = 0,05n_{36}$ ;

### фиктивный сток этилена

$f_{29}: n_{1,10}^*/n_{2,10}^* = 1$ ;

### фиктивный источник 1,2-дихлорэтана

$f_{30}: n_{1,10}^*/n_{3,10}^* = 1$ .

Подставляя УФХС  $f_{16} - f_{30}$  в уравнения МБ  $f_1 - f_{15}$  и делая элементарные преобразования, получим следующую систему линейных уравнений ( $n = m = 15$ ) в матричной форме.

Результаты решения СЛУ с использованием метода Гаусса представлены в табл. 2.5.

Пример. 2.8. Дано одноконтурная ХТС производства продукта В (рис. 2.13), в структуру которой входят смеситель I, адиабатический реактор

Таблица 2.5. Результаты расчета материального баланса ХТС производства 1,2-дихлорэтана

Номер технологического потока	$\text{Cl}_2$ , моль	$\text{C}_2\text{H}_4$ , моль	$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$ , моль	Номер технологического потока	$\text{Cl}_2$ , моль	$\text{C}_2\text{H}_4$ , моль	$\text{C}_2\text{H}_4\text{Cl}_2$ , моль
					1	2	3
1	100	0	0	6	182,56	0,8061	1,849
2	0	100	0	7	9,128	0,0403	0,092245
3	273,43	0,766	1,756	8	173,43	0,7658	1,7565
4	273,43	100,766	1,756	9	0,1827	9,2705	90,597
5	182,74	10,0766	92,45	10	90,689	90,689	90,689

$$\begin{array}{l}
f_1 \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} n_{18} \\ n_{13} \\ n_{28} \\ n_{23} \\ n_{38} \\ n_{33} \\ n_{14} \\ n_{24} \\ n_{34} \\ n_{1,10}^* \\ n_{15} \\ n_{35} \\ n_{19} \\ n_{29} \\ n_{39} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} -100 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -100 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{array} \right] \\
f_2 \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \\
f_3 \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \\
f_4 \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \\
f_5 \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \\
f_6 \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \\
f_7 \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \\
f_8 \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.9 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \\
f_9 \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \\
f_{10} \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.001 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \\
f_{11} \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.092 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \end{array} \right] \\
f_{12} \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.98 & 0 & 0 & -1 & 0 \end{array} \right] \\
f_{13} \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.949 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \\
f_{14} \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.0076 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right] \\
f_{15} \left[ \begin{array}{cccccccccccccc} 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.019 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right]
\end{array}$$

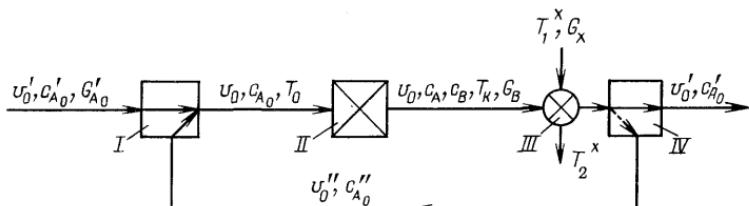


Рис. 2.13. Операторная схема одноконтурной ХТС производства продукта  $B$  по реакции  $A \xrightarrow{k} 2B$

идеального смешения  $I$ , теплообменника  $III$  и сепаратора  $IV$ . В реакторе  $II$  протекает жидкофазная экзотермическая реакция  $A \xrightarrow{k} 2B + \Delta H_r$  (плотность реакционной смеси не изменяется),  $k = 10^{13} \times \exp(-12\ 000/T_{\text{вых}})$ ,  $\text{с}^{-1}$ .

Начальные концентрации веществ на входе в реактор (кмоль  $\times \text{м}^{-3}$ ):  $c_{A_0} = 4,5$ ;  $c_{B_0} = 0$ ; тепловой эффект реакции  $\Delta H_r = 2 \cdot 10^7 \text{ Дж/кмоль } A$ , теплоемкость реакционной смеси  $c_p = 2,2 \cdot 10^3 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$ , плотность реакционной смеси  $\rho = 850 \text{ кг/м}^3$ , температура исходной смеси  $T_0 = 300 \text{ К}$ ; объем реактора  $V = 5 \text{ м}^3$ ; объемная скорость подачи смеси в реактор  $v_0 = 2 \cdot 10^{-3} \text{ м}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ . В сепараторе  $IV$  происходит отделение непрореагировавшего исходного реагента  $A$  для возврата его на вход в реактор, отношение объемной скорости обратного ТП к скорости подачи смеси в реактор  $n = v_0''/v_0 = 0,17$ ; температура хладагента (воды) на выходе (входе) теплообменника  $T_1 = 298 \text{ К}$  ( $T_2 = 333 \text{ К}$ ).

Определить расход сырья  $G'_{A_0}$  компонента  $A$ , производительность системы  $G_B$  по продукту  $B$  и расход хладагента  $G_x$ ; рассчитать требуемую поверхность теплообменника  $III$ , если коэффициент тепlop передачи  $K = 200 \text{ Дж}/(\text{м}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{К})$ .

*Решение.* Составим систему уравнений материального баланса (2.50) и (2.51) для каждого элемента ХТС.

*смеситель I*

уравнение баланса по общим массовым расходам физических потоков

$$v_0'' + v_0' - v_0 = 0; \quad (1)$$

уравнение баланса по расходу компонента  $A$

$$c_{A_0}'' v_0'' - c_{A_0}' v_0' - c_{A_0} v_0 = 0; \quad (2)$$

*реактор II*

уравнение баланса по расходу компонента  $A$

$$c_{A_0} v_0 - c_A v_0 - k c_A V = 0; \quad (3)$$

УФХС для расчета концентрации компонента  $B$ , составленное на основе стехиометрии реакции

$$c_B - 2(c_{A_0} - c_A) = 0; \quad (4)$$

УФХС для расчета константы скорости реакции

$$k - 10^{13} \exp(-12\ 000/T_{\text{вых}}) = 0; \quad (5)$$

УФХС для расчета количества теплоты  $Q_p$ , которое выделяется в результате протекания реакции

$$Q_p - \Delta H_r(c_{A_0} - c_A)v_0 = 0; \quad (6)$$

УФХС для расчета количества теплоты  $Q_n$ , которое затрачивается на нагревание исходного вещества и продукта реакции

$$Q_n - c_p \rho v_0 (T_{\text{вых}} - T_0) = 0; \quad (7)$$

уравнение теплового баланса реактора

$$Q_n - Q_p = 0; \quad (8)$$

### теплообменник III

УФХС для расчета количества тепла  $\Delta H^r$ , выделяемое при охлаждении реакционной смеси до температуры  $T_{\text{вых}}$

$$H^r - v_0 \rho c_p (T_{\text{вых}} - T_0) = 0; \quad (9)$$

УФХС для расчета количества тепла  $\Delta H^x$ , приобретаемого хладагентом в результате охлаждения реакционной смеси до  $T_{\text{вых}}$

$$H^x - G_x c_{pb} (T_2^x - T_1^x) = 0; \quad (10)$$

уравнение теплового баланса теплообменника

$$H^r - H^x = 0; \quad (11)$$

УФХС для расчета поверхности теплообменника

$$F = H^r / K \Delta t_{cp}; \quad (12)$$

УФХС для расчета движущей силы процесса теплообмена

$$\Delta t_{cp} = \frac{(T_{\text{вых}} - T_2^x) - (T_0 - T_1^x)}{2,3 \lg \left( \frac{T_{\text{вых}} - T_2^x}{T_0 - T_1^x} \right)} \quad (13)$$

### сепаратор IV

уравнение баланса по расходу компонента A

$$c''_{A_0} v_0'' - c_A v_0 = 0; \quad (14)$$

УФХС для определения доли обратного ТП

$$v_0'' / v_0 - n = 0; \quad (15)$$

УФХС для расчета:

a) расхода потока питания компонента A

$$G'_{A_0} - c'_{A_0} v_0' = 0; \quad (16)$$

б) производительности ХТС по продукту B

$$G_B - c_B v_0 = 0. \quad (17)$$

Проведем анализ составленной системы уравнений МТБ. Число уравнений  $N = 17$ . Общее число информационных переменных  $M = 29$  ( $v'_0, v_0, v''_0, c'_A, c_{A_0}, c''_{A_0}, c_A, k, V, C_B, T_{\text{вых}}, Q_p, \Delta H_r, Q_n, c_p, \rho, T_0, H^r, H^x, G_x, c_{pb}, T_1^x, T_2^x, F, K, \Delta t_{cp}, n, G_{A_0}, G_B$ ). Таким образом, степень свободы системы уравнений равна  $F = M - N = 29 - 17 = 12$ . По условию задачи известны 12 информационных переменных ( $c_{A_0}, \Delta H_r, c_p, \rho, T_0, V, v_0, n, c_{pb}, T_1^x, T_2^x, K$ ). Следовательно, задача поставлена технологически и математически корректно и имеет единственное решение.

Уравнения (3), (5)–(8) решаются совместно методом простой итерации с шагом  $\Delta T_{\text{вых}} = 2K$ , начиная с  $T_{\text{вых}} = T_0$ . В результате получены следующие значения исходных информационных переменных  $c_A = 0,085 \text{ кмоль/м}^3$ ,  $T_{\text{вых}} = 348 \text{ К}$ . По уравнению (4) рассчитывается концентрация компонента B на выходе из реактора  $c_B = 9,83 \text{ кмоль/м}^3$ .

Далее по уравнению (17) определяют производительность системы по выпуску продукта B

$$G_B = c_B v_0 = 9,83 \times 2 \times 10^{-3} = 1,97 \times 10^{-2} \text{ кмоль/с.}$$

Решая совместно уравнения (9)–(11), можно определить расход хладагента  $G_x = 2,052 \text{ кг}/\text{с}$ , а из уравнений (12), (13) требуемую поверхность теплообмена  $F = 482,0 \text{ м}^2$ .

Подставляя уравнение (15) в (14), получим

$$G''_{A_0} = c_A/n. \quad (18)$$

Из уравнения (1) получают:

$$v'_0 = (1 - n)v_0; \quad (19)$$

тогда из уравнения (19)  $v'_0 = (1 - 0,17) \times 2 \times 10^{-3} = 1,66 \times 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$ , а величина  $v''_0 = v_0 - v'_0 = (2 - 1,66) \times 10^{-3} = 0,34 \times 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}$ .

Подставляя уравнение (18) и числовые значения  $v_0$ ,  $v'_0$ ,  $v''_0$ ,  $c_{A_0}$  и  $c_A$  в уравнение (2), получают значение концентрации компонента  $A$  в потоке свежего питания  $c'_{A_0} = 5,32 \text{ кмоль}/\text{м}^3$ . Тогда из уравнения (16) можно определить расход потока свежего питания ХТС компонентом  $A$ :

$$G'_{A_0} = 5,32 \times 1,66 \times 10^{-3} = 8,83 \times 10^{-3} \text{ кмоль}/\text{с}.$$

## 2.9. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТЕПЕНИ СВОБОДЫ ХТС

Переменные и параметры ХТС, входящие в математическую модель системы (2.37) и (2.38), называют *информационными переменными*. Функциональные соотношения, или функциональные связи, математической модели ХТС представляют собой систему  $n$  независимых неявных функций  $m$  информационных переменных:

$$\bar{f}(\bar{z}) = 0; \quad (2.82)$$

где  $\bar{f} = (f_1, f_2, \dots, f_n)$  –  $n$ -мерная вектор-функция от  $m$ -мерного вектора информационных переменных  $\bar{z}(z_1, z_2, \dots, z_m)$ .

Каждая неявная функция  $f_i$  зависит от  $k$ -мерного вектора информационных переменных:

$$\bar{z}_j = (z_1, z_2, \dots, z_k): \quad f_i(\bar{z}_j) = 0. \quad (2.83)$$

Так как число информационных переменных, характеризующих функционирование любого элемента или подсистемы, всегда меньше общего числа информационных переменных, входящих в математическую модель ХТС, для неявной функции  $f_i$  (2.83) справедливо соотношение  $k < m$ .

Поскольку число основных законов природы, определяющих процессы функционирования ХТС, меньше числа переменных и параметров системы, для которого эти законы справедливы, а число элементов сложных ХТС всегда меньше числа ТП, для математической модели любого ХТС вида (2.82) справедливо соотношение  $n \leq m$ .

*Степень свободы ХТС*  $F$  – это положительное число, равное разности между числом информационных переменных  $m$ , которое необходимо для составления полной математической модели системы, и числом информационных связей  $n$ , или условий, которые существуют между информационными переменными:

$$F = m - n \geq 0.$$

(2.84)

Наличие степени свободы  $F$  позволяет представить множество, или вектор информационных переменных системы как объединение двух множеств, или векторов:

$$\bar{z} = \bar{x} \cup \bar{y}; \quad (2.85)$$

$$\bar{x} \cap \bar{y} \neq \emptyset, \quad (2.86)$$

где  $\bar{x} = (x_1, x_2, \dots, x_{m-n})$  –  $(m-n)$ -мерный вектор свободных переменных XTC;  $\bar{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)$  –  $n$ -мерный вектор базисных переменных;  $\cup$  ( $\cap$ ) – операция объединения (пересечения) множеств;  $\emptyset$  – пустое множество.

Кратко рассмотрим основные понятия теории множеств. **Множество** – это конечная или бесконечная совокупность объектов любой природы, называемых элементами множества. Рассуждения, которые далее приведены, не зависят от природы этих объектов, последние могут быть оценками свойств XTC: передаточными функциями элементов XTC, информационными переменными XTC и т. д. Множества обозначают большими латинскими буквами  $A, B, X, \dots$ , а элементы множества – малыми латинскими буквами  $a, b, x, \dots$ . Множество  $A$ , элементами которого являются  $a, b, c, d$ , обозначают символом  $A = \{a, b, c, d\}$ . Целесообразно рассматривать также пустое множество  $\emptyset$ , т. е. множество, не содержащее элементов. Как правило, любое множество  $A$  определяется не перечислением его элементов, а указанием свойств этих элементов, например множество простых чисел можно записать так:  $A = \{x/x\text{-число простое}\}$ . **Мощностью множества**  $A$  называют число элементов  $n$ , образующих данное множество, и обозначают  $|A| = n$ .

Для отображения принадлежности элементов множеству используют следующие обозначения:  $a \in A$  ( $a$  – это элемент множества  $A$ );  $a \notin A$  ( $a$  не является элементом множества  $A$ ).

Если  $A$  и  $B$  – это множества, то между ними могут быть следующие виды отношений – «содержится»; «совпадает» («не совпадает»), «строго содержится», которые обозначаются следующим образом:

$A \subset B$  ( $A$  содержится в  $B$ , или  $A$  – это подмножество множества  $B$ , т. е. все элементы множества  $A$  являются элементами множества  $B$ ).

$A = B$  ( $A$  совпадает с  $B$ , т. е.  $A \subset B$  и  $B \subset A$ );  $A \neq B$  ( $A$  не совпадает с  $B$ );  $A \subset \subset B$  ( $A$  строго содержится в  $B$ , т. е.  $A \subset B$  и  $A \neq B$ ).

Для двух множеств  $A$  и  $B$  справедливы следующие операции: «объединение», «пересечение», «разность», «симметрическая разность» и «декартово произведение».

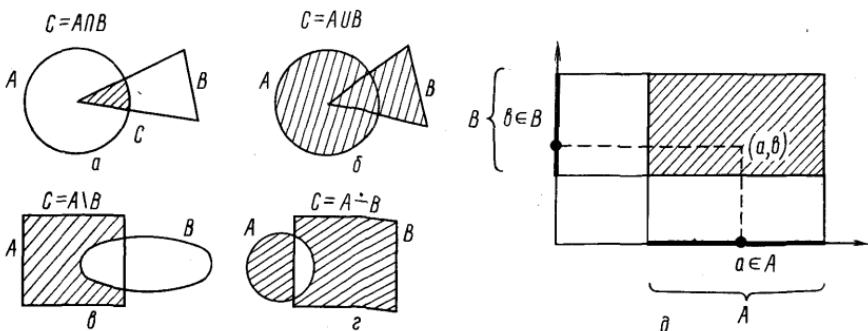


Рис. 2.14. Диаграммы Эйлера для операций над множествами:

$a$  – пересечения;  $b$  – объединения;  $c$  – разности;  $d$  – симметрической разности;  $d$  – декартова произведения

Для наглядного представления операций над множествами используют диаграммы Эйлера (рис. 2.14).

Рассмотрим определения этих операций.

Объединение множеств  $A$  и  $B$ :  $C = A \cup B$  – это множество  $C$  элементов, принадлежащих или  $A$  или  $B$ , или обоим этим множествам (рис. 2.14,б).

Пересечение множеств  $A$  и  $B$ :  $C = A \cap B$  – это множество  $C$  элементов, принадлежащих как  $A$ , так и  $B$  (рис. 2.14,а)

Разность множеств  $A$  и  $B$ :  $C = A \setminus B$  – это множество  $C$  элементов, принадлежащих  $A$ , но не принадлежащих  $B$ , причем необязательно, чтобы  $B \subset A$  (рис. 2.14,б).

Симметрическая разность множеств  $A$  и  $B$ :  $C = A \dot{-} B$  – это множество  $C$  элементов, принадлежащих  $A$ , но не принадлежащих  $B$ , и элементов, принадлежащих  $B$ , но не принадлежащих  $A$  (рис. 2.14,с). Можно показать что справедливо следующее тождество:

$$A \dot{-} B = (A \setminus B) \cup (B \setminus A).$$

Декартово произведение множеств  $A$  и  $B$ :  $C = A \times B$  – это множество  $C$  пар  $(a, b)$ , образованных двумя объектами  $a \in A$  и  $b \in B$  (рис. 2.14,д).

Объединение, пересечение, декартово произведение можно определить не только для двух множеств  $A$  и  $B$ , но и для семейства множеств  $(A_1, A_2, \dots, A_n)$ . Объединение семейства множеств  $A_i$  – это множество элементов, каждый из которых принадлежит хотя бы одному  $A_i$ ; оно обозначается символом  $\bigcup_i A_i$ .

$i$  Пересечение семейства множеств  $A_i$  – это множество элементов, принадлежащих всем  $A_i$  сразу, оно обозначается символом  $\bigcap_i A_i$ .

$i$  Декартово произведение семейства множеств  $A_i$  – это множество упорядоченных последовательностей  $(a_i / i = 1, 2, \dots)$ , где  $a_i \in A_i$  для каждого  $i$ , оно обозначается символом  $\prod_i A_i$ .

$\wedge$  Для операций объединения и пересечения множеств справедливы следующие законы. Закон коммутативности:  $A \cup B = B \cup A$ ;  $A \cap B = B \cap A$ , закон ассоциативности:  $A \cup (B \cup C) = (A \cup B) \cup C$ ;  $A \cap (B \cap C) = (A \cap B) \cap C$ . Закон дистрибутивности:  $A \cap (B \cup C) = (A \cap B) \cup (A \cap C)$ ;  $A \cup (B \cap C) = (A \cup B) \cap (A \cup C)$ . Закон идемпотентности:  $A \cup A \equiv A$ ,  $A \cap A \equiv A$ .

Если множество свободных (независимых) информационных переменных ХТС  $\bar{x}$  известно, то неявная вектор-функция  $\bar{f}$  (2.82) может быть представлена в виде явной  $n$ -мерной вектор-функции базисных (зависимых) переменных системы от  $(m - n)$ -мерного вектора свободных (независимых) информационных переменных ХТС:

$$\bar{f}(\bar{x}, \bar{y}) = 0; \quad (2.87) \quad \bar{y} = \bar{g}(\bar{x}), \quad (2.88)$$

где  $\bar{g}(g_1, g_2, \dots, g_n)$  – вектор-функция базисных переменных системы.

Таким образом, степень свободы ХТС  $F$  представляет собой число свободных (независимых) информационных переменных, которые необходимы и достаточны для однозначного математического описания процессов функционирования ХТС. Все свободные информационные переменные системы должны быть независимыми между собой. Число степеней свободы соответствует числу управляемых переменных и определяет число регуляторов или систем автоматического управления, необходимых для обеспечения заданного качества процесса функционирования ХТС или подсистемы.

В выборе свободных информационных переменных и численных значений их величин при исследовании ХТС имеется определенная свобода действий, которые, однако, не должны нарушать требований физико-химических и технологических условий функционирования ХТС.

Существование свободы действий при выборе свободных информационных переменных и определении числовых значений их величин в некотором допустимом технологическими условиями диапазоне значений создает принципиальную возможность оптимизации качества функционирования ХТС.

Если при составлении ММ некоторой ХТС или подсистемы оказывается, что число информационных связей больше числа переменных, т. е.  $n > m$ , то задача анализа или оптимизации ХТС в математическом и (или) физико-химическом аспекте сформулирована некорректно, или неправильно. В этом случае невозможно найти величины всех переменных, которые удовлетворяют информационным связям ХТС. В правильно поставленной задаче анализа ХТС при  $n = m$  не существует никакой свободы действий в определении численных значений информационных переменных: только лишь вполне определенные численные значения переменных удовлетворяют информационным связям системы (2.82).

Пример 2.9. Необходимо определить число степеней свободы и выбрать свободные информационные переменные ТО смешения двух потоков некоторой ХТС.

*Решение.* Простейшая математическая модель рассматриваемого элемента ХТС может быть представлена в следующем виде.

**Случай I.** Материальный баланс по общим расходам физических потоков: а)  $A + B - C = 0$ . Степень соотношения компонентов, определяющая качество смеси: б)  $S = B/A$ . Смеситель является элементом ХТС, поэтому его информационные переменные должны удовлетворять некоторым условиям: в)  $A = A^*$ ; г)  $C = C^*$ ; д)  $S = S^*$ .

Число информационных связей составленной ММ смесителя  $n = 5$ , а число информационных переменных ( $A, B, C, S$ ) равно  $m = 4$ . Значение величины незаданной информационной переменной  $B$ , которое удовлетворяло бы всем информационным связям, найти невозможно, ибо задача сформулирована неправильно.

**Случай II.** Математическая модель смесителя представлена совокупностью четырех информационных связей ( $n = 4$ ): а)  $A + B - C = 0$ ; б)  $S = B/A$ ; в)  $A = A^*$ ; г)  $S = S^*$ . Так как в данном случае  $m = n$ , а по условиям взаимосвязи смесителя с другими элементами ХТС заданы только лишь две информационные переменные

( $A$  и  $S$ ), то оставшиеся информационные переменные ( $B$  и  $C$ ) определяются однозначно. В рассмотренных выше случаях задача оптимизации процесса функционирования элемента ХТС не имеет места, так как отсутствуют какие-либо варьируемые условия и значения информационных переменных строго фиксированы.

**Случай III.** Если из ММ смесителя (случай II) устраниТЬ информационную связь, определяющую величину степени соотношения компонентов  $S$ , то оставшееся число информационных связей будет равно  $n = 3$ , а число информационных переменных сохраняется ( $m = 4$ ). Появляется одна степень свободы, т.е. для однозначного описания процесса функционирования смесителя из трех информационных переменных ( $B; C; S$ ) одну можно выбрать как свободную (независимую) переменную. Изменяя численное значение этой свободной переменной, получают несколько значений величин информационных переменных  $B, C$  и  $S$ , которые удовлетворяют заданным информационным связям элемента ХТС. Эта степень свободы может быть использована для решения задачи оптимизации функционирования смесителя в соответствии с некоторым критерием качества.

Если в структуру ХТС входит ХТП, соответствующий равновесной термодинамической гетерогенной физико-химической подсистеме, то число степеней свободы этой подсистемы  $F$  определяют по правилу Гиббса. Правило Гиббса устанавливает число и характер свободных информационных переменных, которые необходимы и достаточны для однозначного определения всех свойств равновесной неоднородной термодинамической подсистемы, состоящей из  $\varphi$  фаз и  $k$  компонентов. ММ такой термодинамической подсистемы представляет собой совокупность  $\varphi$  уравнений Гиббса – Дюгема для каждой фазы:

$$S^l dT - V^l dp + \sum_{i=1}^k N_i^l d\mu_i = 0.$$

где  $l = \overline{1, \varphi}$  – номер фазы системы;  $i = \overline{1, k}$  – номер компонента в каждой фазе;  $N_i^l$  – число молей;  $V^l$  – объем данной фазы;  $S^l$  – энтропия данной фазы;  $T$  – температура;  $p$  – давление;  $\mu_i$  – химический потенциал;  $p$  и  $\mu_i$  вследствие равновесного состояния подсистемы одинаковы в каждой фазе.

Число информационных переменных в равновесной термодинамической подсистеме, таким образом, равно  $m = (k + 2)$ , число информационных связей  $n = \varphi$ . По правилу Гиббса число степеней свободы равновесной открытой термодинамической подсистемы в отсутствие химических реакций при условии, что все компоненты распределены между фазами равно:

$$F_G = m - n = k + 2 - \varphi. \quad (2.89)$$

Необходимо отметить, что и в отсутствие равновесия число информационных связей в подсистеме также равно  $n = \varphi$ , а число переменных  $m = (k + 2)$ . Число степеней свободы неравновесной многофазной термодинамической подсистемы выразится также уравнением (2.89).

Правило фаз Гиббса (2.89) сформулировано с использованием интенсивных (или удельных) величин состояния и не содержит никакой информации о массе фаз. Из этого следует, что кроме

$(k + 2)$  интенсивных величин, характеризующих состояние подсистемы, для каждой фазы может быть выбрана еще одна экстенсивная (или количественная) величина. В этом случае число степеней свободы выражается уравнением

$$F_E = F_G + \varphi, \quad (2.90)$$

а для одной фазы

$$F = k + 2. \quad (2.91)$$

В соответствии с уравнением (2.91) можно сделать вывод, что для однозначного описания свойств однофазной термодинамической подсистемы с одним входным и одним выходным потоком необходимо иметь численные значения  $(k + 1)$  интенсивных величин – температура, давление –,  $(k - 1)$  – мольных долей компонентов и одной экстенсивной величины (расход массы).

Пример 2.10. Необходимо определить степени свободы для простого ТО, имеющего один вход и один выход, для ТО диффузионного разделения, имеющего один входной и два выходных ТП, и для ТО смешения, имеющего два входных и один выходной ТП. Каждый из указанных ТО будем рассматривать как некоторую равновесную термодинамическую систему, в которой не происходят химические и физические превращения, а ТП являются гомогенными и состоят из  $c$  компонентов. Состояние каждого ТП характеризуется  $(c + 2)$  информационными переменными.

*Решение.* В соответствии с уравнением (2.91) число степеней свободы простого ТО равно  $F = c + 2$ .

Определение числа степеней свободы для ТО диффузионного разделения и ТО смешения поясняют табл. 2.6 и 2.7.

Таким образом, для однозначного описания ТО диффузионного разделения к числу  $(c + 2)$  свободных информационных переменных, которыми являются массовый расход, покомпонентный состав, температура и давление входного ТП, необходимо добавить еще одну свободную информационную переменную. В качестве этой свободной переменной можно выбрать, например, массовый расход одного из выходных потоков ТО, т. е. экстенсивную величину, либо коэффициент

Таблица 2.6. Определение числа степеней свободы технологического оператора диффузионного разделения

Информационные переменные	
Вид	Число
Массовый расход компонентов технологических потоков	$3c$
Тепловой поток	3
Поток импульса (количество движения)	3
Общее число информационных переменных ТО	$(3c + 6)$

Информационные связи	
вид	число
Покомпонентный состав технологических потоков	$2(c - 1)$
Температуры соответствуют значениям	2
Давление соответствует значению	2
Материальный баланс элемента	1
Общее число информационных связей элемента	$(2c + 3)$
Число степеней свободы ТО	$(c + 3)$

Таблица 2.7. Определение числа степеней свободы технологического оператора смешения

Информационные переменные		
вид	число	
Массовый расход компонентов технологических потоков	3с	
Тепловой поток	3	
Поток импульса	3	
Общее число информационных переменных ТО	(3с + 6)	

Информационные связи		
вид	число	
Материальный баланс массовых расходов компонентов	c	
Тепловой баланс элемента	1	
Баланс импульса	1	
Общее число информационных связей ТО	(c + 2)	
Число степеней свободы ТО	(2c + 4)	

соотношения массовых расходов двух любых ТП, т. е. безразмерную интенсивную величину.

При рассмотрении ТО смешения из табл. 2.7 очевидно, что массовый расход и физическое состояние двух ТП определяют однозначно массовый расход в том же агрегатном состоянии и физическое состояние третьего технологического потока ТО смешения.

Рассмотрим методику определения числа степеней свободы  $F_{ХС}$  в целом, если известны степени свободы  $F_{zi}$  каждого  $i$ -го элемента ХС.

Число степеней свободы  $F_{ХС}$ , состоящей из совокупности нескольких элементов (подсистем), зависит от числа степеней свободы каждого элемента (подсистемы) и от структуры технологических связей между элементами (подсистемами) следующим образом:

$$F = \sum_{i=1}^n F_{zi} - \sum_{j=1}^k \mathfrak{F}_j, \quad (2.92)$$

где  $F$  – число степеней свободы ХС;  $F_{zi}$  – число степеней свободы каждого  $i$ -го элемента (подсистемы) или степень свободы каждого  $i$ -го элемента;  $\mathfrak{F}_j$  – число информационных переменных, соответствующее каждой  $j$ -й технологической связи ( $j$ -му физическому потоку) между соседними элементами (или  $j$ -й точке соприкосновения элементов).

## 2.10. РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ВЫБОРУ РЕГЛАМЕНТИРОВАННЫХ ОПТИМИЗИРУЮЩИХ ИНФОРМАЦИОННЫХ ПЕРЕМЕННЫХ ХС

При решении задач проектирования и эксплуатации ХС часто обнаруживается неопределенность и возникают немалые сложности при выборе свободных информационных переменных (СВИП), имеющих первостепенное значение для однозначного математического описания ХС. Это обусловлено тем фактом, что общую универсальную методику выбора среди множества

информационных переменных (ИП) подмножества свободных (независимых) переменных разработать невозможно, так как каждая исследуемая ХТС строго индивидуальна по характеру процессов функционирования. Однако можно дать некоторые основные рекомендации по выбору СВИП системы.

В инженерно-технологическом аспекте все ИП, полностью характеризующие функционирование ХТС подразделяют на проектные (заданные) и расчетные (искомые) переменные. Проектные переменные ХТС – это такие переменные, которые характеризуют основную цель функционирования ХТС, воздействия на систему или подсистему окружающей среды, взаимосвязь данной системы с другими ХТС и возможность оптимизации процессов функционирования ХТС в соответствии с некоторым КЭ. Расчетные (искомые) переменные ХТС – это такие ИП, которые отображают основную цель решения задач проектирования и эксплуатации ХТС.

В качестве СВИП системы из всего множества ИП могут быть выбраны только лишь проектные переменные ХТС. Среди проектных переменных выделяют регламентированные и оптимизирующие или управляющие переменные ХТС.

Таким образом, для числа степеней свободы ХТС справедливо соотношение:

$$f = f_n - f_p + f_o, \quad (2.93)$$

где  $f_n$  – число проектных переменных,  $f_p$  ( $f_o$ ) – число регламентированных (оптимизирующих) переменных ХТС.

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

Значительную часть регламентированных переменных выбирают по результатам анализа ТЗ на проектирование с учетом требований технологических условий. К регламентированным переменным относят следующие технологические параметры ХТС: параметры состояния и свойств ТП и продуктов; типы растворителей и катализаторов; параметры по ТП теплоносителей на входе в теплообменные системы и выходе из них, а также параметры технологических режимов элементов или подсистем.

Другую группу регламентированных переменных составляют конструкционные параметры элементов или подсистем.

Оптимизирующие переменные – это такие ИП, варьирование значений которых при заданных регламентированных переменных обеспечивает оптимизацию процесса функционирования ХТС в соответствии с некоторым КЭ (1.3).

Функционирование ХТС протекает при определенных ограничениях на качественные и количественные значения технологических и конструкционных переменных системы. Так, по условиям обеспечения взрывобезопасности функционирования ХТС

для подсистем с окислительными процессами начальные концентрации реагентов должны быть меньше предела взываемости; температура ТП системы ограничена возможностями теплообменников и нагревательных устройств; максимально допустимое изменение давления обусловлено характеристиками насосов или компрессоров; по условиям сохранности катализатора иногда требуется, чтобы концентрация некоторых компонентов в реакторе не уменьшалась ниже определенного уровня и т. п.

Конструкционные параметры элементов ограничены требованиями ГОСТов, межведомственных и ведомственных нормативов, а также характеристиками прочности и надежности оборудования.

Для корректной инженерно-технологической постановки задач проектирования и эксплуатации ХТС и резкого сокращения объема вычислительных процедур в качестве оптимизирующих проектных переменных рекомендуется прежде всего выбирать ИП двух видов: 1) ИП, принимающие согласно ТЗ и технологическим условиям дискретные значения (например, конструкционный тип аппарата, стандартизованные геометрические размеры оборудования, допустимые типы катализатора или растворителя и т. д.); 2) ИП, которые по ТЗ и технологическим условиям или вследствие взаимодействия элементов ХТС, могут принимать узко ограниченный диапазон возможных значений.

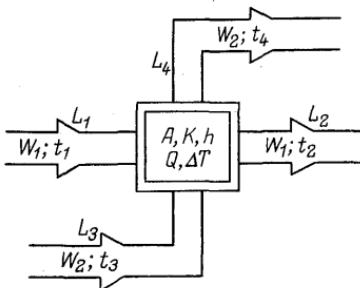
Так, если по технологическим условиям температура  $t^*$ , при которой происходит химическое превращение в реакторе, ограничена узким диапазоном значений  $t_{\min} < t^* < t_{\max}$ , то эту ИП целесообразно выбрать как оптимизирующую переменную ХТС. Изменяя величину  $t^*$  в заданном диапазоне температур, можно определить оптимальный технологический режим в реакторе. Между тем, если бы эта ИП  $t^*$  была бы принята как расчетная (зависимая) переменная, то ее численное значение можно было бы определить только после решения системы уравнений ММ реактора и, следовательно, только тогда убедиться, удовлетворяет ли полученный оптимальный технологический режим ограничению на температуру в реакторе. Такое решение задачи оптимизации требует большого числа вычислительных процедур.

Если число степеней свободы ХТС после выбора в качестве оптимизирующих переменных указанных выше двух видов ИП остается еще не полностью израсходованным, то в качестве оптимизирующих выбирают такие ИП, изменение значений которых в широком диапазоне при заданных регламентированных переменных обеспечивает оптимизацию системы.

Отметим, что подразделение проектных переменных ХТС на регламентированные и оптимизирующие несколько относительно, так как в зависимости от конкретных условий функционирования ХТС одни и те же ИП могут быть либо оптимизирующими, либо регламентированными. Так, если поток исходной реак-

Рис. 2.15. Структурная схема и информационные переменные теплообменника XTC:

$A$  – поверхность теплообмена;  $K$  – конструкционный тип теплообменника;  $h$  – общий коэффициент теплопередачи;  $W_1, W_2$  – массовые расходы охлаждаемой жидкости и хладагента;  $t_1 - t_4$  – температуры технологических потоков  $L_1 - L_4$ ;  $\Delta T$  – среднелогарифмическая движущая сила теплопередачи;  $Q$  – количество тепла, переданное потоком горячей жидкости потоку хладоносителя



ционной смеси поступает в реактор из какой-либо другой подсистемы и его массовый расход, состав и давление нельзя изменять по некоторой желаемой программе или стабилизировать, то эти ИП будут регламентированными, а в противном случае – оптимизирующими переменными системами. При решении задач проектирования оптимальных XTC оптимизирующими переменными являются как технологические, так и конструкционные параметры; при оптимизации действующих XTC – только технологические параметры, обеспечивающие наилучшие показатели функционирования.

Пример 2.11. Определить число степеней свободы и выбрать регламентированные и оптимизирующие информационные переменные для теплообменника XTC (рис. 2.15). Теплообменник предназначен для охлаждения потока горячей жидкости  $L_1$  (массовый расход  $W_1 = W_1^*$ ) от температуры  $t_1 = t_1^*$  до температуры  $t_2 = t_2^*$ . В качестве хладоносителя используют поток воды  $L_3$  с температурой  $t_3 = t_3^*$ .

Решение. Функционирование теплообменника полностью характеризуется 11 информационными переменными:  $K$  – конструкционный тип теплообменника (противоточный, прямоточный, кожухотрубный, труба в трубе и т. п.);  $A$  – поверхность теплообмена;  $Q$  – количество тепла, переданное потоком горячей жидкости потоку хладоносителя,  $h$  – общий коэффициент теплопередачи,  $\Delta T$  – среднелогарифмическая движущая сила теплопередачи,  $t_1 (t_2)$  – температура горячего потока на входе (выходе) теплообменника;  $t_3 (t_4)$  – температура хладоносителя на входе (выходе) теплообменника;  $W_1 (W_2)$  – массовый расход потока  $L_1 (L_3)$ .

ММ теплообменника имеет следующий вид:  
основные уравнения теплопередачи

$$f_1: Q = h A \Delta T;$$

$$f_2: \Delta T = [(t_1 - t_4) - (t_2 - t_3)] / \ln [(t_1 - t_4) / (t_2 - t_3)];$$

$$f_3: h = f(K, t_1, \dots, t_4, W_1, W_2);$$

уравнения теплового баланса

$$f_4: W_1 \bar{c}(t_1 - t_2) - W_2 \bar{c}_b(t_4 - t_3) = 0;$$

$$f_5: Q = W_1 \bar{c}(t_1 - t_2).$$

Таким образом, для теплообменника имеем:  $n = 5$ ,  $m = 11$ , число степеней свободы:  $F = m - n = 6$ . В соответствии с технологическими условиями функционирования теплообменника в XTC регламентированными переменными являются:  $W_1$ ;  $t_1$ ;  $t_2$ ;  $t_3$ . Общее число регламентированных переменных  $F_p = 4$ , следовательно, число оптимизирующих переменных  $F_o = F - F_p = 2$ .

В качестве оптимизирующих переменных можно выбирать  $K$  – конструкционный тип теплообменника и  $W_2$  – массовый расход хладоносителя. Варьирование этих переменных обеспечит оптимизацию функционирования теплообменника. Численные значения базисных (искомых) информационных переменных ( $A; Q; h; \Delta T; t_4$ ) получают после решения уравнений ММ теплообменника.

## 2.11. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

В. 2-1. Какими способами могут быть разработаны операторно-символические математические модели элементов ХТС?

В. 2-2. Какие виды математических операторов могут использоваться при составлении операторно-символических моделей ХТС?

В. 2-3. В чем сущность прямого метода идентификации ХТС?

В. 2-4. Какие методы статистической обработки информации используются при параметрической идентификации ХТС?

В. 2-5. Чему равно общее число необходимых опытов при полном и дробном факторных экспериментах при идентификации ХТС?

В. 2-6. Дайте общую характеристику ортогонального и ротатабельного центрального комплексного планирования экспериментов при идентификации ХТС.

В. 2-7. В чем различие задач проектирования и эксплуатации ХТС?

В. 2-8. Какова роль математического моделирования ХТС при разработке АСУТП?

В. 2-9. В чем сущность задач расчета материально-тепловых балансов ХТС?

В. 2-10. В чем различие операций анализа и оптимизации ХТС?

В. 2-11. Запишите математическую формулировку задач проектного и поверочного анализа ХТС.

В. 2-12. В чем различие блочного и информационного принципов решения задач анализа ХТС?

В. 2-13. Что такое алгоритм оптимальной стратегии решения системы уравнений математической модели ХТС?

В. 2-14. В чем различие параллельного и последовательного способов расчета технологических режимов ХТС?

В. 2-15. Чем различаются технологико-направленный и информационно-направленный способы последовательного, или раздельного расчета технологических режимов ХТС?

В. 2-16. Дайте характеристику процедуры разрыва обратных ТП, которая используется при технологико-направленном последовательном способе анализа сложных многооконтурных ХТС.

В. 2-17. Назовите основные рекомендации по рациональному выбору вычислительного базиса при составлении и расчете систем уравнений МТБ.

В. 2-18. Каким образом при составлении систем уравнений МТБ выбирают сквозное, или связующее вещество?

В. 2-19. Приведите примеры уравнений физико-химических связей, используемых при составлении систем уравнений МТБ химических реакторов, колонн ректификации и теплообменников ХТС.

В. 2-20. В чем отличие физических и фиктивных потоков ХТС?

В. 2-21. Запишите в общем виде уравнения теплового, энергетического и эксергетического балансов одного элемента ХТС.

В. 2-22. Чем обусловлена многовариантность составления систем уравнений балансов ХТС?

В. 2-23. Как математически проверить независимость уравнений, входящих в систему уравнений МТБ?

В. 2-24. Что такое схема химического способа производства ХТС?

В. 2-25. Что такое разреженная, или неплотная матрица? Какие коэффициенты оценивают информационную структуру разреженных матриц?

В. 2-26. Что такое степень свободы ХТС? Как определяют число степеней свободы ХТС?

В. 2-27. Какие основные инженерно-технологические рекомендации используют для рационального выбора набора свободных информационных переменных ХТС?

3.2-1. Составьте в общем виде операторно-символические математические модели ХТС с параллельным соединением трех ТО, с байпасным и обратным технологическим потоком, степени свободы которых определены в примере 2.10.

3.2-2. Для ТО разделения смеси углеводородов, рассмотренного в примерах 4 и 5, с помощью функциональной матрицы Якоби необходимо определить независимые уравнения, входящие в следующую систему уравнений МБ: (1)–(4), (8) и (9), где  $n = 6$ ,  $m = 12$ .

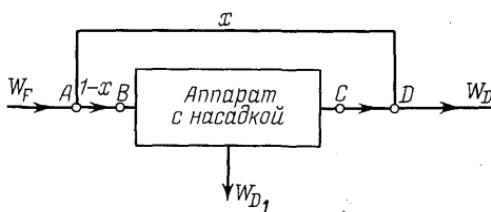


Рис. 2.16. Структурная схема ХТС извлечения радиоактивного стронция из сырья:

*A* – точка разделения входного потока; *B* и *C* – соответственно точки входа технологических потоков в аппарат и выхода из него;  $W_F$ ,  $W_D$  – входной и выходной потоки; *D* – точка смешения;  $x$  – доля сырья в байпасе

3.2-3. Извлечение радиоактивного стронция-90 из сырья, содержащего в своем составе кальций и стронций, осуществляется в аппарате с насадкой из  $\text{CaHPO}_4$ , который охвачен байпасным потоком (рис. 2.16). В аппарате с насадкой происходит полное извлечение радиоактивного стронция и частичное извлечение ионов кальция (97% ионов Ca). Согласно санитарным требованиям, сырье на выходе из аппарата должно содержать не менее  $5 \times 10^{-5} \text{ кг}/\text{м}^3$  кальция. Таким образом, сырье, содержащее  $4,85 \times 10^{-4} \text{ кг}/\text{м}^3$  стронция-90 и  $10^{-3} \text{ кг}/\text{м}^3$  кальция должно быть пропущено через аппарат с насадкой из  $\text{CaHPO}_4$ , чтобы извлечь как можно больше стронция при одновременном выполнении требований санитарных норм по содержанию кальция.

Необходимо определить концентрацию стронция в выходящем потоке (в г/л) в предположении, что состав насадки постоянен и что выходная концентрация в точке *B* не изменяется со временем.

3.2-4. Для ХТС орошения артезианской минерализованной воды (см. пример 2.1) необходимо составить две эквивалентные системы уравнений МБ для расчета массового расхода рассола и концентрации соли в рассоле, которые по сравнению с системой уравнений в примере 2.1 удовлетворяют следующим условиям: 1) не содержат уравнение МБ для ХТС в целом и уравнение баланса по массовому расходу соли для смесителя; 2) содержат уравнения баланса по расходу соли для бака-водоприемника и для ХТС в целом.

3.2-5. Данна одноконтурная ХТС (рис. 2.17), в структуру которой входят смеситель *I*, реактор идеального смешения *II* и разделитель *III*. В реакторе

протекают реакции  $A + B \rightarrow 2R$  и  $B \rightleftharpoons S$ . Константы скоростей реакции равны:

$$k_1 = 2,7 \times 10^{-3} \text{ с}^{-1} (\text{кмоль}/\text{м}^3)^{-1}; \quad k_2 = 1,2 \times 10^{-3} \text{ с}^{-1} (\text{кмоль}/\text{м}^3)^{-1}; \quad k_3 = 3,1 \times 10^{-3} \text{ с}^{-1} (\text{кмоль}/\text{м}^3)^{-1}. \quad \text{В начальный момент времени } C_{S_0} = C_{R_0} = 0; \quad \text{плотность реакционной смеси постоянна; общая скорость подачи } v_0 = 2 \times 10^{-3} \text{ м}^3/\text{с}^{-1}. \quad \text{Отно-}$$

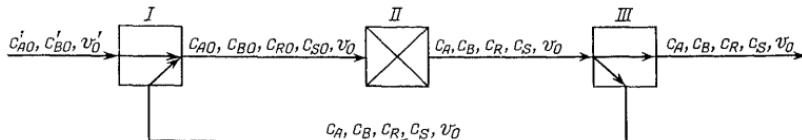


Рис. 2.17. Операторная схема одноконтурной ХТС производства продукта  $P$  по реакции  $A + B \rightarrow 2R$  и  $B \rightleftharpoons S$

шение объемной скорости рецикла к общей скорости подачи  $n = 0,12$ ; объем реактора  $V = 2 \text{ м}^3$ ; начальные концентрации исходных веществ  $C_{A0} = 1,05 \text{ кмоль}/\text{м}^3$ ;  $C_{B0} = 2,4 \text{ кмоль}/\text{м}^3$ . Необходимо определить концентрацию продукта  $R$  на выходе из ХТС и производительность ХТС по продукту  $R$ .

### Глава 3

## ОПЕРАЦИИ ПЕРЕРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ ПРИ МАТЕМАТИЧЕСКОМ МОДЕЛИРОВАНИИ И АНАЛИЗЕ ХТС

### 3.1. ЛОГИКО-ИНФОРМАЦИОННЫЕ СХЕМЫ ХТС – МОДЕЛИ ПЕРЕРАБОТКИ ИНФОРМАЦИИ

При использовании информационного принципа анализа ХТС (см. раздел 2.4) и информационно направленного последовательного способа анализа ХТС (см. раздел 2.5) перед проведением вычислительных экспериментов на ЭВМ с математической моделью ХТС необходимо наглядно изобразить направления переработки (преобразования) всех информационных переменных, или информационных сигналов ХТС, при численном решении систем уравнений (СУ) их математических моделей.

Стратегию анализа ХТС с использованием информационного принципа и информационно направленного последовательного способа анализа ХТС изображают в виде логико-информационных схем ХТС.

*Логико-информационная схема (ЛИНС) ХТС* – это модель преобразования информационных потоков, которая отображает информационные взаимосвязи между ММ отдельных элементов системы в виде информационных операторов, а также особенности преобразования входных информационных потоков (ИПТ) ХТС в выходные ИПТ системы (см. раздел 2.5). В логико-информационной схеме ХТС информационный оператор каждого элемента изображают в виде блока переработки информации, а каждый информационный поток, который соответствует либо информационной переменной физического потока ХТС, либо технологическому и конструкционному параметру отдельного элемента ХТС, изображают направленной линией. Изображаемые на ЛИНС *входные информационные потоки* каждого отдельного ИО

соответствуют его свободным информационным переменным, а его *выходные ИП* – базисным ИП (см. раздел 2.9). При построении ЛИНС считают, что входные информационные потоки ХТС выходят из некоторых независимых источников информации, а выходные связаны с некоторыми *приемниками информации*. Источники и приемники информации на ЛИНС рисуют заштрихованными двойными кружками.

Так как при анализе и оптимизации ХТС для отдельного элемента (подсистемы) свободные и базисные ИП могут в общем случае соответствовать информационным переменным как входных, так и выходных физических потоков элемента, направление ИПТ, отображающих параметры некоторого физического потока, может совпадать и (или) не совпадать с направлением этого физического потока ХТС.

При построении ЛИНС весьма часто необходимо использовать единичные информационные операторы, которые осуществляют преобразование одного входного ИПТ во множество тождественных выходных ИПТ. Каждый единичный ИО изображают на ЛИНС двойным кружком, внутри которого рисуется единичная матрица  $[E]$ .

Необходимо отметить, что ЛИНС можно построить для отдельного ИО любого элемента ХТС или рассматривать в виде ИО каждое уравнение математической модели этого элемента.

Приведем примеры построения ЛИНС в соответствии с изложенными правилами. Для теплообменника ХТС, определение степени свободы которого было рассмотрено в примере 2.11, логико-информационная схема теплообменника, или ИО изображена на рис. 3.1, а. На рис. 3.1, б изображена ЛИНС этого же теплообменника, когда его математическую модель рассматривают как совокупность пяти ИО, каждый из которых соответствует одному из уравнений  $f_1 - f_5$ .

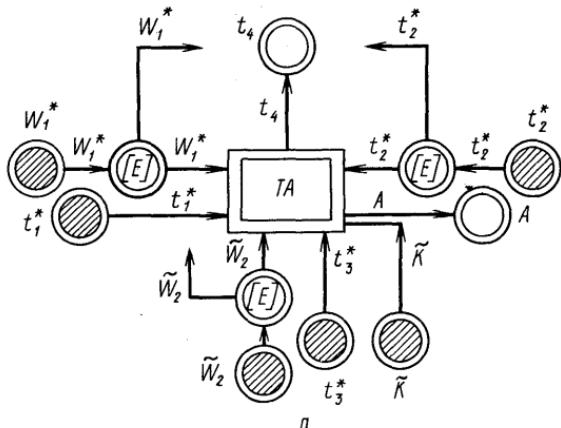
Логико-информационная схема одноконтурной ХТС, общий вид математической модели которой был рассмотрен в примере 2.1, изображена на рис. 3.2.

**Пример 3.1.** Данна подсистема экстракции некоторой ХТС, операторная схема которой изображена на рис. 3.3, а. Качество функционирования подсистемы определяется КЭ вида:

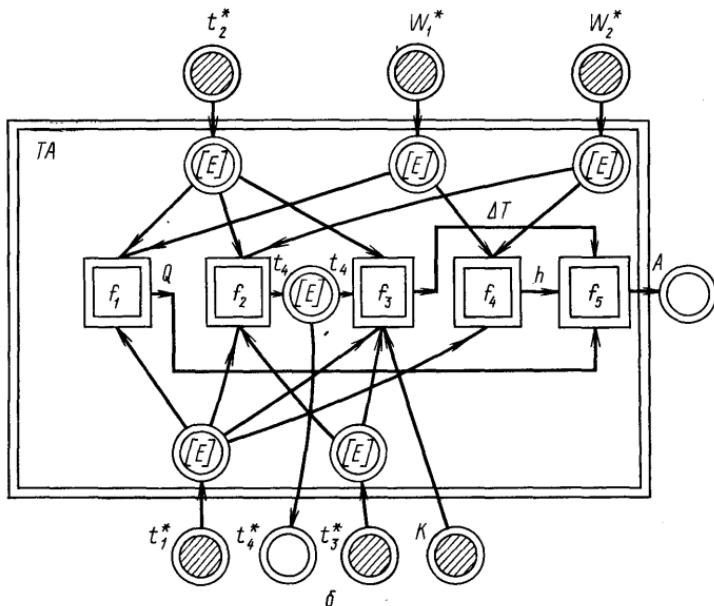
$$\psi = c_q Q(x_1 - x_0) - c_w W,$$

где  $Q$  – массовый расход первичного растворителя смеси компонентов;  $W$  – массовый расход вторичного растворителя (экстрагента);  $x_1$  – начальная концентрация экстрагируемого компонента в смеси;  $x_0$  – концентрация экстрагируемого компонента в рафинате;  $c_q$  ( $c_w$ ) – стоимость единицы массы экстрагируемого компонента (экстрагента).

Необходимо записать математическую постановку задачи определения оптимальных величин массового расхода  $W$  и типа  $S$  экстрагента, при которых  $\psi^* = \max \psi$ , а также нарисовать логико-информационную схему подсистемы, отображающую стратегию решения этой задачи. По технологическим условиям



a



б

Рис. 3.1. Логико-информационные схемы теплообменника, математическая модель которого рассматривается как один ИО (а) и как совокупность пяти ИО (б):

TA – теплообменный аппарат;  $f_i$  –  $i$ -й информационный оператор, отображающий  $i$ -е уравнение математической модели теплообменника

функционирования экстракционной подсистемы в ХТС определены значения величин  $Q = Q^*$  и  $x_1 = x_1^*$ , а также указано, что экстрагент  $S$  может быть двух типов:  $A$  или  $B$ .

*Решение.* Для записи математической постановки задачи оптимизации прежде всего составим упрощенную ММ исследуемой подсистемы в следующем виде: уравнение материального баланса по экстрагируемому компоненту

$$f_1: Q(x_1 - x_0) - Wy_0 = 0;$$

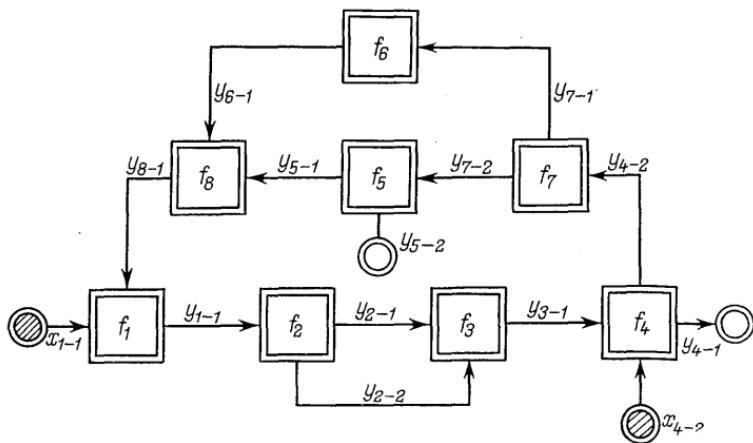


Рис. 3.2. Логико-информационная схема одноконтурной ХТС:  
 $f_i$  – ИО  $i$ -го уравнения математической модели ХТС

уравнение фазового равновесия экстракта и рафината для каждого типа экстрагента

$$f_2 : \Phi(x_0, y_0, S) = 0,$$

где  $y_0(x_0)$  – относительная концентрация экстрагируемого компонента в экстракте (в рафинате).

В соответствии с условиями задачи очевидно, что общее число ИП подсистемы:  $m = 6$ , число регламентированных ИП:  $F_p = 2$ , число информационных связей ММ:  $n = 2$ . Следовательно, при оптимизации экстракционной подсистемы число оптимизирующих ИП равно:  $F_0 = F - F_p = (m - n) - F_p = 2$ . Таким образом, если выбирать в качестве оптимизирующих ИП тип экстрагента ( $S = A$  или  $B$ ) и его массовый расход  $W$ , то для определения наибольшего значения КЭ  $\psi^*$  и значений базисных ИП необходимо одновременно решать два уравнения ММ  $f_1$  и  $f_2$ . Математическая постановка задачи оптимизации подсистемы экстракции при  $S$  и  $W$ , выбранных в качестве оптимизирующих ИП, имеет вид:

$$\psi = \max \psi = \max [c_q Q(x_1 - x_0) - c_w W].$$

$$S, W \quad S, W$$

ЛИНС подсистемы экстракции, соответствующие стратегии решения рассмотренной задачи оптимизации, представлены на рис. 3.3, б и 3.4, а.

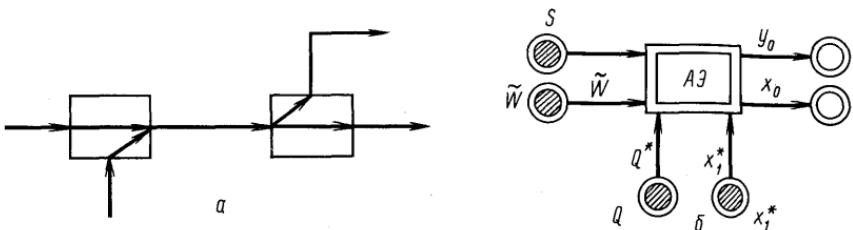


Рис. 3.3. Операторная (а) и логико-информационная (б) схемы подсистемы экстракции, математическая модель которой представлена как один ИО ( $AЭ$  – аппарат экстракции)

Логико-информационные схемы ХТС целесообразно использовать для определения числа степеней свободы ХТС (см. раздел 2.9) по формуле (2.92). Если определенная совокупность элементов образует некоторую ХТС, то ИО этих элементов взаимосвязываются между собой информационными потоками, структура которых обуславливает степень свободы системы. При взаимосвязи ИО элементов степень свободы каждого элемента остается величиной постоянной, значение которой равно числу входных ИП этого элемента на ЛИНС.

Каждому набору свободных и базисных информационных переменных ХТС соответствует вполне определенное направление информационных потоков на ЛИНС. Если ИП между информационными операторами двух элементов образуют информационный контур, то для определения значений базисных ИП системы уравнений ММ этих элементов необходимо решать совместно.

Наличие информационных контуров на ЛИНС, образованных информационными потоками, обусловливает трудоемкость вычислительных операций при решении задачи анализа и оптимизации ХТС. С целью оптимизации вычислительных операций можно изменять набор свободных и базисных ИП, т.е. осуществлять инверсию направления информационных потоков на ЛИНС и образовывать новые источники и стоки информации таким образом, чтобы полностью исключить или сократить число и размеры информационных контуров в ЛИНС. При изменении наборов свободных и базисных ИП математической модели ХТС, т.е. при инверсии направлений информационных потоков на ЛИНС системы, число степеней свободы каждого элемента и ХТС в целом должно оставаться постоянным. Очевидно, что изменение направления каждого ИП, связанное с

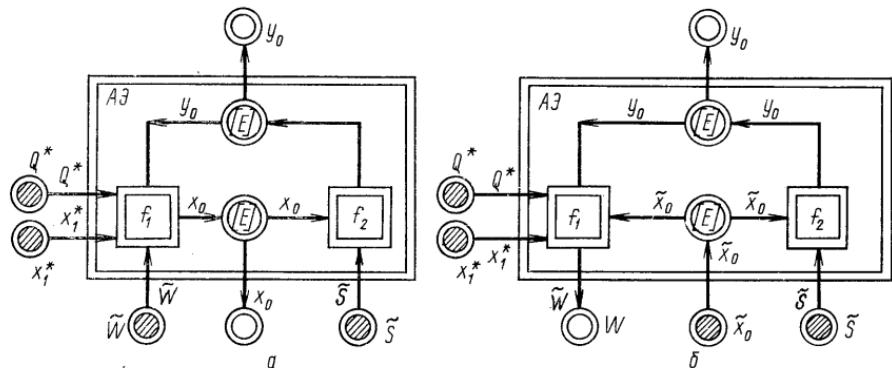


Рис. 3.4. Логико-информационные схемы подсистемы экстракции ХТС при различных наборах оптимизирующих информационных переменных:  $\tilde{W}$  и  $\tilde{S}$  (a); и  $\tilde{x}_0$  и  $\tilde{S}$  (б)

определенным ИО, соответствует преобразованию вида уравнения математической модели этого ИО, которое однако не всегда возможно осуществить из-за наличия как физико-химических и технологических ограничений, так и ряда формальных математических условий.

Для осуществления весьма трудоемкой операции изменения направлений информационных потоков на ЛИНС при выборе оптимальной стратегии решения задач анализа ХТС необходимо использовать специальные топологические модели и алгоритмы (см. раздел 4.5).

На рис. 3.4, б приведена ЛИНС подсистемы экстракции (см. рис. 3.3), которая получена в результате замены исходного набора оптимизирующих свободных ИП ( $W$  и  $S$ ) новым набором свободных ИП ( $\tilde{x}_0$  и  $\tilde{S}$ ), что соответствует инверсии направлений информационных потоков  $\tilde{x}_0$  и  $\tilde{W}$  в исходной ЛИНС (см. рис. 3.4, а). Необходимо отметить, что в результате этой инверсии направлений ИП  $x_0$  и  $W$  в новой ЛИНС (см. рис. 3.4, б) информационный контур не существует.

### 3.2. СТРАТЕГИЯ РЕШЕНИЯ ИНФОРМАЦИОННО РАЗРЕЖЕННЫХ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ХТС

При решении разнообразных задач анализа, оптимизации и синтеза ХТС типичной операцией переработки информации ЭВМ является переработка информационных массивов в виде больших неплотных, или разреженных матриц. Учет информационной разреженности систем уравнений ММ сложных ХТС позволяет существенно сократить требуемый объем оперативной памяти, снизить время и повысить точность расчета на ЭВМ, создавая тем самым объективные предпосылки для значительного увеличения размерности решаемых задач анализа, оптимизации и синтеза ХТС.

Эффективность учета информационной разреженности проявляется в возможности как существенного сокращения времени вычислений при выполнении операций с разреженными матрицами, так и значительного снижения требуемой памяти оперативно-запоминающих устройств (ОЗУ) ЭВМ. С этой целью при арифметических операциях с разреженными матрицами необходимо не выполнять арифметические действия с заранее известным результатом, так как один из операндов (сомножитель или слагаемое) представляет собой нулевой элемент матриц. Значительное снижение объема памяти ОЗУ при выполнении операций с разреженными матрицами обусловлено возможностью хранения в ОЗУ только ненулевых элементов матриц.

Для разработки оптимальной стратегии решения информационно-разреженных СУ можно использовать два подхода: на основе метода последовательной подстановки ИП; на основе

использования стандартных блочно-компактных форм (СБКФ) разреженных матриц.

Рассмотрим методику разработки оптимальной стратегии с применением метода последовательной подстановки ИП, которая базируется на свойстве разрешимости СУ относительно информационных переменных, на возможности изменения набора свободных и базисных ИП данной СУ, а также на возможности изменения направлений информационных потоков в ЛИНС, которая отображает СУ данной ХТС.

Свойство разрешимости СУ относительно информационных переменных состоит в том, что для любого уравнения

$$f_i(z_1, z_2, \dots, z_k) = 0,$$

входящего в СУ (2.82), можно при заданных значениях  $z_1^*, z_2^*, \dots, z_{k-1}^*$  ( $k - 1$ ) ИП из  $k$ , входящих в это уравнение, однозначно подобрать значение  $k$ -й переменной  $z_k^{**}$  так, чтобы функция  $f_i(z_1^*, z_2^*, \dots, z_{k-1}^*, z_k^{**})$  тождественно стала равной нулю, т.е.

$$f_i(z_1^*, z_2^*, \dots, z_{k-1}^*, z_k^{**}) \equiv 0.$$

Следовательно, каждое  $f_i$  уравнение СУ, содержащее  $k$  ИП, при фиксированных значениях ( $k - 1$ ) ИП  $(z_1^*, z_2^*, \dots, z_{k-1}^*)$ , входящих в это уравнение, можно при определенных условиях разрешить относительно  $z_k^{**}$ , т.е. представить эту переменную как явную функцию ( $k - 1$ ) ИП уравнения:

$$z_k^{**} = \varphi_i(z_1^*, z_2^*, \dots, z_{k-1}^*).$$

Информационную переменную  $z_k^{**}$ , относительно которой разрешают данное  $f_i$  уравнение, называют выходной ИП уравнения. Информационные переменные, входящие в уравнение  $f_i$ , при фиксированных значениях которых определяют величину выходной переменной, называют входными ИП уравнения. При изменении набора ( $k - 1$ ) входных ИП будет происходить изменение выходной ИП уравнения.

При заданном наборе свободных информационных переменных ХТС любой набор выходных ИП системы уравнений должен удовлетворять следующим условиям: 1) каждое уравнение имеет только одну выходную переменную; 2) каждая базисная информационная переменная СУ может быть выходной переменной только в одном уравнении.

Совокупность данного набора выходных переменных СУ соответствует множеству (или вектору) базисных информационных переменных ХТС. Множество входных переменных СУ состоит из подмножества всех свободных ИП и подмножества некоторой части базисных информационных переменных ХТС, обусловливающих взаимосвязь уравнений между собой.

При заданном или выбранном наборе свободных информационных переменных ХТС набор базисных ИП определяется

взаимнооднозначно. Однако этому набору базисных ИП соответствует целое множество наборов выходных ИП уравнений, которое для системы  $N$  уравнений с плотной матрицей равно ( $N!$ ).

Набор выходных ИП уравнений определяет взаимосвязь уравнений и трудоемкость вычислительных процедур решения СУ методом последовательной подстановки. Некоторый набор выходных переменных СУ позволяет осуществить декомпозицию всей СУ на совокупность строго соподчиненных совместно разомкнутых и совместно замкнутых подсистем уравнений.

Совместно разомкнутую СУ образуют такие уравнения, численные значения выходных переменных которых можно определить без осуществления итерационных процедур в некотором последовательном порядке для каждого из уравнений в отдельности.

Совместно замкнутую СУ образуют такие уравнения, численные значения выходных переменных которых можно определить аналитическими или итерационными методами (см. раздел 7.2) лишь в результате одновременного совместного их решения. Для численного решения совместно замкнутых СУ будем использовать способ разрыва некоторых выходных ИП, по которым проводятся итерационные процедуры. Необходимо отметить, что этот способ решения совместно замкнутых СУ методологически совпадает со способом расчета встречнонаправленных ХТС с использованием процедуры разрыва особых технологических потоков (см. раздел 2.5).

Строго соподчиненные СУ называют такие, которые можно решить в отдельности в некотором последовательном порядке. Строго соподчиненные СУ не содержат взаимосвязанных уравнений, решаемых одновременно и совместно друг с другом.

Стратегия решения информационно разреженных многомерных СУ – это порядок решения методом последовательной подстановки переменных отдельных уравнений данной СУ, который установлен в результате выбора набора выходных ИП уравнений, позволяющего осуществить декомпозицию исходной СУ на строго соподчиненные подсистемы уравнений, а также в результате проведения разрывов по некоторым выходным ИП для каждой совместно замкнутой подсистемы уравнений. В дальнейшем алгоритмом стратегии решения СУ будем называть порядок решения ее уравнений на основе метода последовательной подстановки с использованием способов декомпозиции и разрывов при некотором определенном наборе выходных ИП данной системы уравнений.

В общем случае выбор наборов свободных и выходных ИП системы уравнений математической модели ХТС, обуславливающих трудоемкость вычислительных процедур при решении задач анализа и оптимизации ХТС как в технологическом аспекте, так и в математическом неоднозначен.

*Алгоритм оптимальной стратегии решения СУ* определяется таким рациональным выбором набора свободных и выходных ИП системы уравнений, который соответствует заданным технологическим условиям функционирования ХТС и обеспечивает оптимальную стратегию решения СУ способом декомпозиции этой системы на несколько строго соподчиненных подсистем уравнений, среди которых имеются совместно замкнутые подсистемы, содержащие минимальное число взаимосвязанных уравнений.

Пример 3.2. Для трех систем уравнений ММ некоторых ХТС вида  $A$ ,  $B$  и  $C$  необходимо выделить строго соподчиненные, совместно замкнутые и совместно разомкнутые подсистемы уравнений, если набор свободных ИП  $d$  задан по технологическим условиям:

Система  $A$

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, d) &= 0; \\ f_2(x_1, x_2, x_3, x_4, d) &= 0; \\ f_3(x_4, d) &= 0; \\ f_4(x_3, x_4, d) &= 0; \\ f_5(x_2, x_4, x_5) &= 0. \end{aligned}$$

Система  $B$

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, x_3, d) &= 0; \\ f_2(x_2, x_3, d) &= 0; \\ f_3(x_1, x_2, d) &= 0. \end{aligned}$$

Система  $C$

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_3, d) &= 0; \\ f_2(x_1, x_2, d) &= 0; \\ f_3(x_1, x_2, x_3, d) &= 0; \\ f_4(x_3, x_4, x_5) &= 0; \\ f_5(x_4, x_5) &= 0. \end{aligned}$$

*Решение.* Выделение строго соподчиненных, совместно замкнутых  $s_{zi}$  и совместно разомкнутых  $s_{pj}$  подсистем в СУ видов  $A$ ,  $B$  и  $C$  и при некоторых наборах выходных ИП поясняет табл. 3.1.

Пример 3.3. Показать для ММ подсистемы экстракции, рассмотренной в примере 3.1, возможность неоднозначного выбора набора свободных информационных переменных. Для каждого возможного набора свободных ИП построить ЛИНС; выбрать рациональный набор свободных ИП, соответствующий технолог-

Таблица 3.1. Выделение строго соподчиненных, совместно замкнутых и совместно разомкнутых подсистем в трех системах уравнений математических моделей ХТС

Вид сис-	Набор выход-	Совместно разомк-	Совместно замкнутые под-	Строго со-	Алгоритм стратегии	
темы	ных информа-	нутые подсистемы	системы уравнений	подчинен-	решения системы	
урав-	ционных пе-	уравнений		ные под-	уравнений	
	пере-	менная		системы		
$A$	$f_1$ $f_2$ $f_3$ $f_4$ $f_5$	$x_2$ $x_1$ $x_4$ $x_3$ $x_5$	$s_{p1} = \{f_3; f_4\}$ $s_{p2} = \{f_5\}$	$s_{z1} = \{f_2; f_1\}$ $s_{z2} = \{f_1; f_3; f_2\}$	$s_{p1}; s_{z1}$ $s_{p2}$	$f_3; f_4$ $\{f_2; f_1\}$ $f_5$
$B$	$f_1$ $f_2$ $f_3$	$x_1$ $x_3$ $x_2$	Нет	$s_{z1} = \{f_1; f_3\}$ $s_{z2} = \{f_1; f_3; f_2\}$	Нет	$\{f_1; f_3; f_2\}$
$C$	$f_1$ $f_2$ $f_3$ $f_4$ $f_5$	$x_1$ $x_2$ $x_3$ $x_4$ $x_5$	Нет	$s_{z1} = \{f_1; f_2; f_3\}$ $s_{z2} = \{f_4; f_5\}$	$s_{z1}$ $s_{z2}$	$\{f_1; f_2; f_3\}$ $\{f_4; f_5\}$

гическим условиям функционирования ХТС и обеспечивающий декомпозицию системы уравнений ММ на строго соподчиненные уравнения.

*Решение.* Для анализируемой подсистемы имеем  $n = 2$  и  $m = 6$ ; две информационные переменные  $Q$  и  $x_1$  — регламентированные. Необходимо рассмотреть все возможные наборы из двух оптимизирующих ИП. Общее число таких наборов оптимизирующих ИП  $P = C_{m-F_p}^{F_0}$ , т. е. равно числу сочетаний из  $(m - F_p)$  элементов по  $F_0$  элементов в каждом сочетании. Так как  $F = m - n = F_0 - F_p$ , то  $F = 4$  и  $F_0 = 2$ .

В первый набор оптимизирующих ИП вошли тип экстрагента  $\tilde{S}$  ( $A$  или  $B$ ) и массовый расход экстрагента  $\tilde{W}$ . Логико-информационная схема, соответствующая этим оптимизирующими ИП, представлена на рис. 3.4, а. Как было показано в этом случае, при решении задачи отыскания экстремума КЭ  $\psi$  и определении численных значений базисных ИП необходимо одновременно решать два уравнения математической модели. Каждому набору оптимизирующих ИП при заданном виде КЭ  $\psi$  соответствует новая формулировка задачи оптимизации.

Если в качестве оптимизирующих ИП выбирают величину начальной концентрации экстрагируемого компонента  $x_0$  в исходной смеси и тип экстрагента  $\tilde{S}$ , то вычислительные процедуры намного упрощаются. По диаграммам равновесия определяют для некоторого  $x_0$  величину концентрации экстрагируемого компонента  $y_0$  в экстракте, а затем по уравнению материального баланса для экстрагируемого компонента находят массовый расход экстрагента  $W$ . Изменение направления ИПТ в структуре ЛИНС подсистемы экстракции (рис. 3.4, б) обеспечило декомпозицию СУ математической модели на два строго соподчиненных уравнения.

Сравнительная оценка других четырех наборов оптимизирующих ИП дана в табл. 3.2, а соответствующие им ЛИНС представлены на рис. 3.5. В соответствии с набором оптимизирующих ИП  $\tilde{S}$  и  $\tilde{x}_0$  (или  $\tilde{S}$  и  $\tilde{y}_0$ ), который обеспечивает минимальные вычислительные трудности при расчете СУ математической модели подсистемы, необходимо видоизменить в отличие от выражения, полученного в примере 3.1, постановку задачи оптимизации следующим образом:

$$\begin{aligned}\psi^* = \max \psi &= \max [c_q Q(x_1 - x_0) - c_w W]; \\ S \begin{cases} A \\ B \end{cases} & \\ 0 \leq x_0 \leq x_1^*; & \\ (\text{или } y_0 = y_1^*). &\end{aligned}$$

Выбор в качестве свободных ИП наборов  $(\tilde{y}_0, \tilde{x}_0); (\tilde{W}, \tilde{x}_0); (\tilde{W}, \tilde{y}_0)$  невозможен, так как такие наборы оптимизирующих ИП не соответствуют заданным технологическим условиям функционирования подсистемы экстракции. Например, выбор произвольных значений относительной концентрации экстрагируемого компонента в рафинате  $x_0$  и массового расхода экстрагента  $W$  приводит к необходимости определять вид уравнения равновесия и тип экстрагента, который,

Таблица 3.2. Сравнительная оценка возможных наборов оптимизирующих информационных переменных

Оптимизирующие информационные переменные	Число совместно решаемых уравнений	Число строго соподчиненных уравнений	Трудоемкость вычислений	Соответствие техническим условиям	Логико-информационная схема
$\tilde{S}; \tilde{W}$	2	0	8	Да	Рис. 3.4, а
$\tilde{S}; \tilde{x}$	0	2	2	»	Рис. 3.4, б
$\tilde{S}; \tilde{y}$	0	2	2	»	Рис. 3.5, а
$\tilde{y}; \tilde{x}$	—	—	—	Нет	Рис. 3.5, б
$\tilde{W}; \tilde{x}_0$	—	—	—	»	Рис. 3.5, в
$\tilde{W}; \tilde{y}$	—	—	—	»	Рис. 3.5, г

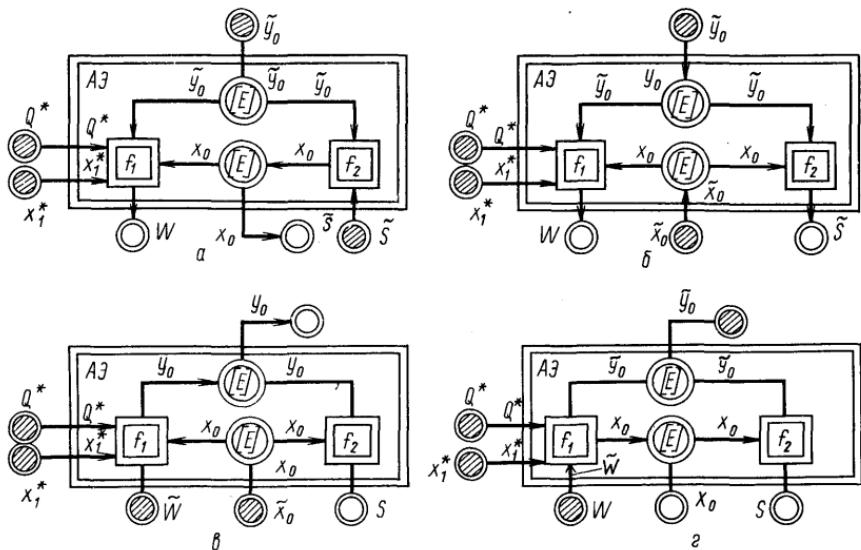


Рис. 3.5. Логико-информационные схемы для четырех различных наборов оптимизирующих переменных:  $\tilde{S}$ ,  $\tilde{y}_0$  (a);  $\tilde{x}_0$ ,  $\tilde{y}_0$  (b);  $\tilde{x}_0$ ,  $\tilde{W}$  (c);  $\tilde{y}_0$ ,  $\tilde{W}$  (d)

однако, по технологическим условиям ограничен только двумя типами ( $S = A$  или  $B$ ).

Разработка алгоритмов оптимальной стратегии решения информационно разреженных многомерных СУ представляет собой сложную комбинаторно-логическую процедуру. В связи с этим для разработки алгоритмов оптимальной стратегии решения многомерных СУ математических моделей ХТС необходимо применять основанные на использовании топологических моделей ХТС специальные алгоритмы преобразования исходной информационной структуры СУ либо к какой-то новой упорядоченной информационной структуре, либо к одной из определенных стандартных блочно-компактных форм. Для численного решения СУ с разреженными матрицами, имеющими определенные СБКФ, разработаны эффективные алгоритмы (см. раздел 7.4).

### 3.3. КЛАССИФИКАЦИЯ МОДУЛЕЙ РАСЧЕТА ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ ХТС

В общем случае ММ каждого технологического оператора ХТС (1:4) представляет собой систему нелинейных алгебраических уравнений (СНАУ) или дифференциальных уравнений большой размерности, решение которой на ЭВМ требует значительного времени. В связи с этим при расчете СУ математической модели ХТС вида (2.39) могут возникать определенные трудности, обусловленные ограниченным объемом памяти ОЗУ и быстродействием ЭВМ.

На начальных этапах математического моделирования и анализа ХТС создаются более простые математические модели ТО с желаемым уровнем адекватности. На завершающих этапах анализа ХТС необходимо использовать сложные математические модели ТО, которые более полно учитывают кинетику ХТП и наиболее реально отражают влияние параметров технологических режимов и параметров элементов на функционирование ХТС в целом. Наиболее широко для разработки упрощенных математических моделей ТО используют методы линеаризации и теории приближений функций, методы планирования эксперимента, а также методы аппроксимации непрерывных элементов с распределенными параметрами дискретными элементами с сосредоточенными параметрами.

При решении задач анализа и оптимизации ХТС этап разработки математических моделей ТО, входящих в ХТС, является одним из наименее формализованных и наиболее трудоемких. Так, в общем бюджете времени на математическое моделирование, анализ и оптимизацию ХТС производства серной кислоты из серы затраты времени на разработку ММ отдельных ТО системы и проверку их адекватности составляют около 55%.

При анализе ХТС (см. раздел 2.4) математическую модель каждого ТО рассматривают как модуль расчета ТО. Модуль расчета технологического оператора, или ХТП, представляет собой информационный оператор, который позволяет, используя некоторый алгоритм, численно решать СУ математический модели данного ТО и рассчитывать значения выходных информационных переменных ТО как функцию значений свободных информационных переменных.

Модели расчета ХТП, которые часто используются при анализе, оптимизации и синтезе различных ХТС, должны быть построены таким образом, чтобы для реализации на ЭВМ вычислительных операций, выполняемых для данного модуля, требовалось минимальное машинное время. Для этой цели при разработке модулей необходимо использовать алгоритмы оптимальной стратегии решения СУ математических моделей (см. раздел 3.2).

Совокупность различных модулей расчета одного класса ТО образует библиотеку. Каждая библиотека модулей расчета ТО, или ХТП – это некоторая подсистема переработки информации, для создания которой необходимо использовать основные принципы построения программного обеспечения САПР и АСУТП: блочность, адаптируемость, модифицируемость и расширяемость.

Рассмотрим функционально-информационные принципы разработки библиотек модулей расчета ХТП, позволяющие определить состав модулей, которые должны входить в структуру некоторой библиотеки, а также информационные взаимосвязи

между отдельными модулями библиотеки. Эти функционально-информационные принципы основаны на следующих признаках классификаций модулей: признак функционального назначения; признак информационности; признак общности применения, или специализации.

На различных этапах анализа, оптимизации и синтеза ХТС необходимо использовать по признаку функционального назначения два вида модулей расчета ХТП: модули расчета состояний и модули расчета параметров. Модуль расчета состояний (МРС) – это ИО, который обеспечивает для определенного конструкционного типа аппарата, где протекает данный ХТП, преобразование вектора параметров входных ТП  $\bar{X}_i$  в вектор переменных состояния ХТП  $\bar{Y}_i$  при заданном векторе параметров окружающей среды  $\bar{V}$  и векторе конструкционных параметров аппарата  $\bar{K}_i$ , а также при известном  $\bar{D}_i^*$  или рассчитываемом векторе технологических параметров ХТП  $[\bar{D}_i(\bar{X}_i, \bar{Y}_i, \bar{K}_i, \bar{V})]$ . Математическая формализация МРС имеет следующий вид:

$$\bar{Y}_i = \bar{F}_i\{\bar{X}_i; \bar{V}, \bar{K}_i, \bar{D}_i(\bar{X}_i, \bar{Y}_i, \bar{K}_i, \bar{V})\},$$

где  $\bar{F}_i\{\cdot\}$  – информационный оператор.

Модуль расчета параметров (МРП) – это ИО, который обеспечивает для определенного конструкционного типа аппарата, где протекает данный ХТП, преобразование векторов параметров входных  $\bar{X}_i$  и выходных  $\bar{Y}_i$  технологических потоков в вектор конструкционных параметров аппарата  $\bar{K}_i$  при заданном векторе параметров окружающей среды  $\bar{V}$ , а также при известном  $\bar{D}^*$  или рассчитываемом векторе технологических параметров ХТП  $[\bar{D}_i(\bar{K}_i, \bar{X}_i, \bar{Y}_i, \bar{V})]$ . Математическая формализация МРП имеет следующий вид:

$$K_i = \Phi\{\bar{X}_i, \bar{Y}_i, \bar{V}, \bar{D}_i(\bar{K}_i, \bar{X}_i, \bar{Y}_i, \bar{V})\},$$

где  $\Phi\{\cdot\}$  – информационный оператор.

В дальнейшем рассматриваются модули расчета состояний и параметров ХТП, которые представляют собой детерминированные, стационарные, линейные и нелинейные параметрические или непараметрические информационные операторы в пространстве состояний.

Признак информационности модулей расчета ХТП отображает объем информации, который может быть получен при использовании модуля для решения задач анализа ХТС. По признаку информационности выделяют следующие три класса модулей: *минимально информационные (или балансовые) модули; расширенные информационные модули; широко информационные модули*.

Классификация по признакам функционального назначения и информационности модулей расчета ТО нагрева – охлаждения,

отображающего теплообмен между двумя технологическими потоками в ТА, представлена на рис. 3.6.

Классификация модулей расчета ХТП или ТО по признаку общности назначения, или специализации основывается на оценке возможности использования данного модуля для отображения процессов функционирования определенного типа элементов или аппаратов ХТС, в которых осуществляется физико-химическое преобразование определенного типа веществ. Выделяют четыре класса модулей расчета состояний ХТП по признаку общности назначения, или специализации: узко специализированные модули, специализированные модули, широко специализированные модули, общие модули.

Кратко рассмотрим характеристику различных классов модулей по признаку общности их применения и методику оценки точности модулей.

*Узко специализированные модули* предназначены для расчета ХТП, протекающих только в определенных элементах ХТС с известными конструкционными и технологическими параметрами при входных ТП, которые содержат заданные виды химических веществ в заданном составе.

*Специализированные модули* осуществляют расчет ХТП, которые протекают в элементах ХТС данного типа с известными конструкционными и технологическими параметрами при входных ТП, образованных совокупностью определенного набора веществ.

*Широко специализированные модули* предназначены для расчета ХТП, происходящих в элементах данного типа при входных

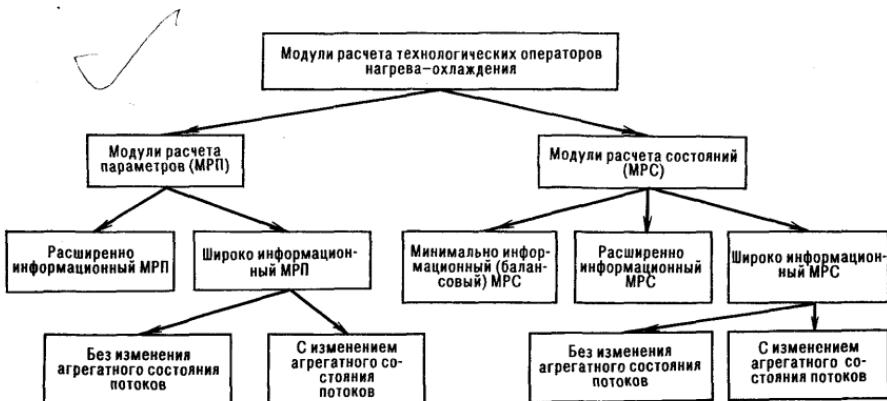


Рис. 3.6. Классификация по признакам функционального назначения и информационности модулей расчета технологических операторов нагрева–охлаждения, отображающих процесс теплообмена между двумя технологическими потоками в теплообменном аппарате (MPC – модуль расчета состояний, МРП – модуль расчета параметров)

технологических потоках, которые состоят из веществ данного класса.

*Общие модули* позволяют осуществить расчет ХТП, которые протекают в любом элементе ХТС данного типа при входных ТП, состоящих из любых веществ. Очевидно, что МРС более высоких степеней общности (широко специализированные и общие) имеют преимущества в отличие от узко специализированных модулей, так как их использование требует при синтезе и анализе ХТС меньшего объема памяти ЭВМ и позволяет избегать повторных вычислений.

Разработка общих модулей дает возможность создавать библиотеки модулей для решения задач анализа, оптимизации и синтеза различных классов ХТС. Однако увеличение степени общности МРС достигается за счет удаления из модулей операций по вычислению конструкционных параметров элементов и параметров физико-химических свойств веществ и смесей. Это приводит к увеличению объема входной информации для МРС и требует создания отдельной подсистемы (или библиотеки) расчета параметров физико-химических свойств веществ и смесей. В зависимости от направленности проводимой исследовательской работы такой подход может быть неудобен и малоэффективен в отношении требуемых затрат машинного времени.

Так как цель математического моделирования ХТС состоит в том, чтобы предсказать процесс функционирования ХТС, необходимо обеспечить модулям расчета ХТП возможность коррекции и экстраполяции параметров применительно к изменяющимся условиям. Такую возможность дают МРС, которые разработаны на основе фундаментального изучения физико-химической сущности ХТП с использованием принципа математического моделирования.

Факторы, от которых зависит *точность модулей расчета ХТП*, следующие: точность (погрешность) представления и достоверности вводимых в ЭВМ числовых данных, которые являются входными ИП модуля; точность (погрешность) расчета значений параметров физико-химических свойств ТП и физико-химических констант ХТП;

степень адекватности математических моделей ХТП; реализуемый в модуле численный метод решения уравнений, который определяет число итераций и наибольшую продолжительность этапов расчета; значение ошибок округления для используемого в ЭВМ способа выполнения различных арифметических операций.

Если в результате решения задач анализа ХТС с заданной точностью оказывается, что точность задачи превышает допустимую, то повышение точности МРС (с учетом особенностей методов вычислительной математики) можно осуществить либо изменением реализуемых в МРС методов вычислений (в частности, увеличением числа итераций и т. п.), либо введением вычис-

лительных операций с числами увеличенной разрядности.

Требуемая точность различных классов МРС, которая необходима при решении задач анализа ХТС, определяется на основе исследования характеристик чувствительности ХТС к изменению параметров МРС и применения методов теории погрешностей вычислений. Анализ характеристик чувствительности ХТС позволяет определить, какие эксперименты необходимо дополнительно провести на пилотной, полупромышленной или промышленной установке для получения более достоверной информации о физико-химических константах ХТП и параметрах свойств ТП системы.

В условиях объективной неопределенности априорной информации о физико-химических константах ХТП и о параметрах свойств ТП для получения достоверных решений задач проектирования и эксплуатации ХТС необходимо в общем случае использовать стохастические или вероятностные модули расчета ХТП.

При составлении СУ математических моделей и описании характеристик различных классов модулей расчета параметров и состояний ТО рекуперативного теплообмена, или ТО нагрева – охлаждения (см. рис. 3.6), отображающих процессы теплообмена (с изменением и без изменения агрегатного состояния потоков) между двумя потоками в теплообменном аппарате (ТА), используется более 30 ИП. Кратко рассмотрим различные классы модулей расчета *TO нагрева – охлаждения*.

*Минимально информационный (балансный) МРС* представляет собой информационный оператор, который реализует безытерационный алгоритм расчета системы уравнений теплового баланса ТА. Показатели информационности этого МРС: число уравнений (базисных переменных)  $N = 3$ , число свободных информационных переменных  $F = 7$ .

*Расширенно информационный МРС* – это информационный оператор, который реализует итерационный алгоритм, включающий пересчет значений конечных температур выходных ТП, которые обеспечиваются поверхностью теплообмена стандартного ТА. Показатели информационности:  $N = 3; F = 11$ .

*Широко информационный МРС* – это ИО, который реализует алгоритм расчета конечных температур выходных ТП, что обеспечивается поверхностью теплообмена стандартного ТА, включая расчет коэффициента теплопередачи. Показатели информационности:  $N = 23; F = 14$ .

*Расширенно информационный МРП* – это ИО, реализующий безытерационный алгоритм расчета поверхности теплообмена из основного уравнения теплопередачи с выбором ТА из стандартного ряда. Показатели информационности МРП:  $N = 4; F = 10$  (при заданных конечных температурах потоков);  $N = 6; F = 9$  (при заданном  $\Delta t_{min}^*$ ).

*Широко информационный МРП* – это информационный оператор, реализующий итерационный алгоритм расчета поверхности теплообмена с выбором ТА из стандартного ряда, включающий расчет коэффициента теплопередачи.

Например, при заданном  $\Delta t_{\min}^*$  показатели информированности:  $N = 23$ ;  $F = 13$ .

Рассмотрим характеристику некоторых модулей расчета *TO химического превращения*.

*Минимально информационный (балансный) МРП* – это ИО, который при заданных значениях массовых расходов, составов, давлений и энталпий входных или выходных потоков ТОХП, степени превращения для ключевого химического компонента из системы уравнений МТБ для выбранного типа реактора определяет его объем, время пребывания и величину приведенных затрат (ПЗ) на функционирование ТОХП.

*Расширенно информационный МРП* – это ИО, который при заданных значениях массовых расходов, составов, давлений и энталпий входных или выходных потоков ТОХП, констант скоростей химических реакций и химического равновесия, коэффициентов тепло- и массопереноса для гетерофазных физико-химических систем из уравнений МТБ, составленных для ключевых компонентов химических реакций для выбранного типа реактора, определяет его объем, время пребывания, температуру (или температурный профиль), степень превращения, обеспечивающие минимум ПЗ на функционирование ТОХП.

*Расширенно информационный МРС* – это ИО, который при заданных значениях массовых расходов, составов, давлений и энталпий входных потоков ТОХП, констант скоростей химических реакций и химического равновесия, коэффициентов тепло- и массопереноса для гетерофазных физико-химических систем, времени пребывания компонентов в реакторе заданного типа, объема реактора из нелинейных уравнений МТБ, составленных для ключевых компонентов химических реакций, определяет степень превращения, составы, энталпии и давления выходных потоков ТОХП.

*Широко информационный МРС* – это ИО, который при заданных значениях массовых расходов, составов, давлений и энталпий входных потоков ТОХП, констант скоростей химических реакций и химического равновесия, коэффициентов переноса для гетерофазных систем, нижних и верхних пределов изменения реакционного объема (или длины реактора), концентраций ключевых компонентов из системы нелинейных интегро-дифференциальных уравнений МТБ, составленных для ключевых компонентов, определяет степень превращения, составы, расходы, энталпии и давления выходных потоков ТОХП.

Рассмотрим характеристики некоторых модулей расчета *TO диффузационного разделения*, отображающих процесс ректифика-

ции многокомпонентных смесей в простых тарельчатых колоннах.

*Минимально информационный (балансный) МРП* – это ИО, который при заданных значениях массовых расходов потоков питания  $F$ , дистиллята  $D$  и (или) кубовой жидкости  $W$ , составов  $\bar{x}_F(x_{Fi}, i = 1, N), \bar{x}_D(x_{Di}, i = 1, N), \bar{x}_W(x_{Wi}, i = 1, N)$ , давлений  $p_F, p_D, p_W$  и энталпий  $H_F, H_D, H_W$  из уравнений материально-теплового баланса с применением уравнений Фенске – Андервуда – Джиллиленда определяет минимальное флегмовое число, оптимальное число тарелок и величину ПЗ на функционирование РК. Число степеней свободы этого модуля  $F = 10 + 0 = 10; F_p \{p_D, p_W, F, D, \bar{x}_F, \bar{x}_D, p_F, H_F, H_D, H_W\}$ ; число базисных ИП модуля  $N = 6 \{R_{min}, R, n_{min}, n, W, \bar{x}_W\}$ .

*Расширенно информационный МРП* – это ИО, который при заданных значениях массовых расходов, составов, энталпий и давлений потоков, соответственно, питания, дистиллята и (или) кубовой жидкости путем потарелочного расчета системы уравнений материального и (или) теплового балансов, фазового равновесия и кинетики массопередачи на тарелках колонны определяет положение тарелки ввода питания, число тарелок и оптимальное флегмовое число, обеспечивающих минимум ПЗ на функционирование РК.

*Широко информационный МРП* – это ИО, который при заданных значениях массовых расходов, составов, энталпий и давлений потоков, соответственно, питания, дистиллята и (или) кубовой жидкости путем потарелочного расчета системы уравнений материального и (или) теплового балансов, фазового равновесия с применением уравнений, учитывающих неидеальность МКС (например, уравнений Вильсона,  $NRTL$ ,  $UNIFAC$  и др.), и кинетики массопередачи с учетом фактора диффузионного взаимодействия компонентов смеси, определяет положение тарелки ввода питания, оптимальное флегмовое число и число тарелок колонны, обеспечивающих минимум ПЗ.

*Расширенно информационный МРС* – это ИО, который при заданных значениях положения тарелки ввода питания, оптимального флегмового числа, числа тарелок, диаметра и высоты РК, массового расхода, состава, энталпии и давления потока питания путем потарелочного расчета СУ материального и (или) теплового балансов, фазового равновесия и кинетики массопередачи определяет массовые расходы, составы, энталпии и давления потоков дистиллята и (или) кубовой жидкости.

*Широко информационный МРС* – это ИО, который при заданных значениях положения тарелки ввода питания, оптимального флегмового числа, числа тарелок диаметра и высоты РК, массового расхода, состава, энталпии и давления потока питания путем потарелочного расчета СУ материального и (или) теплового балансов, фазового равновесия с применением уравнений

Вильсона или *NRTL* кинетики массопередачи с учетом диффузионного взаимодействия компонентов смеси определяет массовые расходы, составы, энталпии и давления потоков дистиллята и (или) кубовой жидкости РК.

Для численного решения СУ, входящих в модули расчета РК, наиболее целесообразно использовать метод независимого определения концентраций с использованием ленточной трехдиагональной матрицы, который имеет широкую область применения для МКС всех видов и РК разных типов (простые, с несколькими вводами и выводами); метод довольно прост и обеспечивает в большинстве случаев достаточно быструю и надежную сходимость итерационных вычислений.

### 3.4. ПОНЯТИЯ КОЭФФИЦИЕНТОВ РАЗДЕЛЕНИЯ И КОЭФФИЦИЕНТОВ ПОЛЕЗНОГО ДЕЙСТВИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ ХТС

Для разработки упрощенных модулей расчета ТО в виде СЛУ с постоянными коэффициентами используют так называемые коэффициенты разделения входных потоков для химических компонентов в ТО.

Коэффициент разделения входного потока (крвп) для химических компонентов ТО – это отношение массового расхода некоторого *i*-го компонента в выходном потоке ТО к массовому расходу *i*-го компонента во входном ТП данного ТО:

$$f_{q(i)} = m_{q(i)} / m_{(i)}, \quad 0 \leq f_{q(i)} \leq 1, \quad (3.1)$$

где  $m_{(i)}$  ( $m_{q(i)}$ ) – массовый расход *i*-го компонента во входном (*q*-ом выходном) ТП.

Значения каждого крвп для любого химического компонента в каждом ТО, или элементе ХТС зависят от параметров элемента, а также в общем случае и от параметров входных технологических потоков. Для определения значений крвп необходимо решать СУ математических моделей отдельных ТО, которые отображают физико-химическую сущность ХТП.

Используя понятие крвп (3.1), математическую модель ТО, в которой не происходит химического превращения (например, ТО разделения), можно записать в виде уравнения МБ для каждого химического компонента (2.51):

$$m_{(i)} = \sum_{q=1}^n f_{q(i)} m_{(i)} = \sum_{q=1}^n m_{q(i)}$$

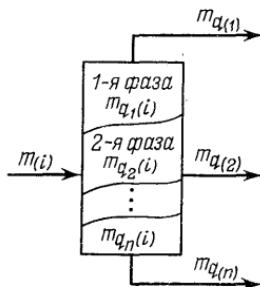
или

$$\sum_{q=1}^n f_{q(i)} = 1,$$

где  $f_{q(i)}$  – крвп для *i*-го компонента в *q*-ом выходном ТП.

Рис. 3.7. Представление математической модели ТО в форме линейных уравнений с коэффициентом разделения входных потоков:

$m_{q(i)}$  – массовый расход  $i$ -го компонента в  $q$ -й фазе вещества



При использовании крвп предполагают, что внутри ТО каждому  $q$ -ому выходному технологическому потоку соответствует определенная  $q$ -я «фаза вещества», имеющая массовый расход  $m_{q(i)}$  (рис. 3.7).

Рассмотрим построение линейной математической модели ТО химического превращения, в котором протекает химическая реакция  $A \xrightarrow{k} B$ , с использованием понятия крвп. На вход ТО поступает реагент  $A$  в количестве  $m_A$ , а в выходном ТП содержится смесь продукта  $B$  в количестве  $m_B^*$  и непрореагировавшего компонента  $A$  в количестве  $m'_A$ . Для представления математической модели  $i$ -го ТО химического превращения (рис. 3.8,  $a$ ) в виде линейного уравнения с крвп предполагают, что реактор состоит из совокупности двух последовательно соединенных ТО разделения:  $\text{TO}_{(i-1)}$  и  $\text{TO}_{(i-2)}$ , в которых не происходит химической реакции. Первый ТО разделения  $\text{TO}_{(i-1)}$  имеет две фазы и два потока на выходе. Первая фаза соответствует количеству компонента  $A$  ( $m_A - m'_A$ ), вступившему в реакцию (фиктивный сток), а вторая фаза – непрореагировавшему количеству компонента  $m'_A$ .

$\text{TO}_{(i-2)}$  имеет также две фазы и два потока на выходе: поток свежего питания  $W_B$ , который отображает количество компонента  $B$ , образовавшегося в реакторе (фиктивный источник), и поток

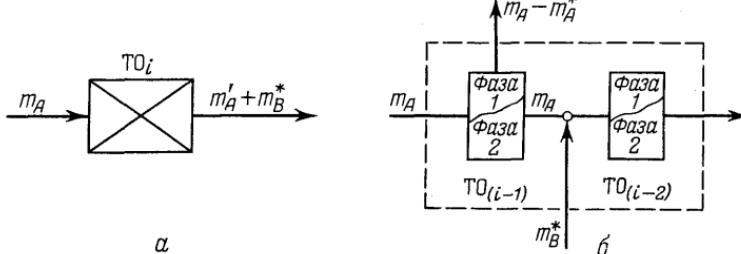


Рис. 3.8. Операторная (а) и структурная (б) схемы химического реактора (волнистая линия – граница раздела фаз; штриховая линия – граница технологического оператора)

$m'_A$ . В этом случае значения крвп для ТО химического превращения определяют следующим образом:

$$f_{q_1(i-1)} = (m_A - m'_A) / m_A; f_{q_2(i-1)} = m'_A / m_A;$$

$$f_{q_1(i-2)} = m'_A / (m'_A + m_B^*); f_{q_2(i-2)} = m_B^* / (m'_A + m_B^*).$$

Если значения крвп для элемента ХТС определены совместным решением уравнений кинетики, фазового равновесия и материального баланса, то крвп представляют собой некоторые постоянные величины, независящие от параметров технологических режимов и параметров входных ТП.

Рассмотрим выражения крвп для компонентов в ТО диффузионного разделения (равновесная дистилляция, ректификация, которые при определенных допущениях не зависят от параметров входных потоков элемента). Для ТО, отображающего процесс равновесной дистилляции двухкомпонентной смеси, при постоянной величине коэффициента относительной летучести  $a_{ik}$  и равновесии пара и жидкости значение крвп  $i$ -го компонента в потоке пара  $f_i$  при известной величине крвп  $k$ -го компонента  $f_k$ , которое определяют с использованием закона Рауля, равно:

$$f_i = (a_{ik} - f_k) / [1 + (a_{ik} - 1)f_k]. \quad (3.2)$$

При условии, что значение крвп  $f_k$  некоторого  $k$ -го ключевого компонента задано, а коэффициент  $a_{ik}$  постоянен, для ТО, отображающего процесс ректификации бинарной смеси в простой колонне, значение крвп  $i$ -го компонента является постоянной величиной, определяемой из модифицированного уравнения Фенске:

$$f_i = a_{ik}^{(N_m+1)} f_k / [1 + (a_{ik}^{(N_m+1)} - 1)f_k], \quad (3.3)$$

где  $N_m$  – минимальное число ступеней разделения в колонне.

Для ТО разделения, отображающего процесс абсорбции сухих газов, значение крвп  $f_i$   $i$ -го поглощаемого компонента определяется следующим образом:

$$f_i = (A_i^{(N+1)} - A_i) / (A_i^{(N+1)} - 1), \quad (3.4)$$

где  $A_i$  – фактор абсорбции, или диффузионный потенциал;  $A_i = L / K_i G$ ;  $L$  – расход абсорбента;  $G$  – расход газа;  $K_i$  – коэффициент фазового равновесия;  $N$  – число ступеней разделения в абсорбере.

Если изменение параметров входного ТП абсорбера не влияет на величину  $A_i$ , то значение крвп  $f_i$  постоянная величина.

Для ТО процесса десорбции значение крвп  $j$ -го десорбированного компонента равно:

$$f_j = (A_j^{-(N+1)} - A_q^{-1}) / (A_j^{-(N+1)} - 1). \quad (3.5)$$

Существует несколько способов определения значений крвп для элементов ХТС. На ранних этапах исследования и проектирования

вания ХТС значения крвп  $f_i$  могут быть заданы, исходя из предположения, что эти величины должны быть достигнуты в реальной ХТС при обеспечении необходимых технологических и конструкционных параметров элементов ХТС. Более того, при наличии многопараметрических ТП необходимо обеспечить также возможность достижения одновременно всех желаемых значений  $f_i (i = 1, n)$ .

Другой способ состоит в определении величины  $f_i$  по экспериментальным данным с использованием методов регрессионного анализа. Однако этот способ имеет недостатки, связанные с невозможностью перенесения полученных зависимостей на другие условия и размеры.

Наилучший способ – получение значений  $f_i$  по ММ, составленной на основе изучения физико-химической сущности ХТП, и экспериментальное уточнение значений  $f_i$ . Такой способ дает наиболее полную информацию о свойствах ХТП. Однако он связан с многочисленными трудностями: функциональная форма нелинейных уравнений ММ не всегда известна (особенно в случае сложных химических процессов); задача проведения эксперимента и определения параметров в нелинейных ММ может быть сложной; наконец, вычислительный эксперимент на самой ММ для определения значений крви, связывающих параметры входных и выходных ТП элементов ХТС, может быть весьма трудоемким. При этом особое значение приобретает проблема аппроксимации решений.

Значения крвп  $f_i$  для различных ТО зависят от значений к.п.д. этих ТО, оценивающих степень приближения ХТП к состоянию равновесия. Рассмотрим выражения к.п.д. для ТО химического превращения, ТО рекуперативного теплообмена и ТО диффузационного разделения.

Для ТО химического превращения к.п.д. равен  $\alpha$  – степени превращения некоторого  $i$ -го реагента. Кроме того, эффективность химического превращения оценивают величиной  $\eta$  – выходом продукта и  $\varphi$  – избирательностью (селективностью) химического превращения веществ.

Формулы для расчета этих величин, а также связи между ними определяются, прежде всего, типом реакции и реактора, а также кинетическими закономерностями химического превращения вещества.

Степень превращения  $\alpha$  исходного вещества:

$$\alpha = (x_0 - x) / x_0, \quad (3.6)$$

где  $x_0$  – начальная концентрация реагирующего вещества;  $x$  – конечная концентрация реагирующего вещества.

При переменном реакционном объеме степень превращения веществ определяется по формуле:

$$\alpha = (x_0 - x) / (x_0 + \varepsilon x); \quad (3.7)$$

$$\varepsilon = (V_1 - V_0)/V_0 \quad \text{или} \quad \varepsilon = (\rho_0 - \rho_1)/\rho_1,$$

где  $V_0$ ,  $V_1$  – реакционный объем при степени превращения  $\alpha = 0$  и  $\alpha = 1$ , соответственно, м<sup>3</sup>;  $\rho_0$ ,  $\rho_1$  – плотность реагирующих веществ при  $\alpha = 0$  и  $\alpha = 1$  соответственно, кг/м<sup>3</sup>.

Степень превращения для необратимых реакций в реакторе идеального вытеснения (РИВ) при  $\varepsilon = 0$  (реакция нулевого порядка;  $-r = k$ ;  $r$  – скорость химической реакции, выраженная по  $i$ -му веществу):

$$\alpha = k\tau/x_0. \quad (3.8)$$

Реакция первого порядка ( $-r = kx$ ):

$$\alpha = 1 - \exp(-k\tau); \quad (3.9)$$

реакция второго порядка ( $-r = kx_1x_2$ ):

$$\ln [(1 - \alpha_2)/(1 - \alpha_1)] = (x_{20} - x_{10})k\tau. \quad (3.10)$$

При стехиометрическом соотношении исходных веществ:

$$x_{20}/x_{10} = 1 \quad \alpha = kx_0\tau/(1 + kx_0\tau). \quad (3.11)$$

Степень превращения для обратимой реакции первого порядка в РИВ ( $-r = k_1x_1 - k_2x_2$ ):

$$\alpha = \alpha^* \{1 - \exp(-k_1\tau/\alpha^*)\}, \quad (3.12)$$

где  $\alpha^*$  – равновесная степень превращения (суммарная скорость реакции  $r = 0$ ).

Для обратимой реакции первого порядка в реакторе идеального смешения (РИС):

$$\alpha = k\tau\alpha^*/(k\tau + \alpha^*). \quad (3.13)$$

Для обратимой реакции второго порядка в РИС:

$$(k_1 - k_2)\tau x_{10}\alpha^2 - (1 + k_1\tau x_{10})\alpha + k_1\tau x_{10} = 0. \quad (3.14)$$

Мгновенная (дифференциальная) избирательность химического процесса:

$$\varphi = r_i/\sum r_j. \quad (3.15)$$

Для параллельно и параллельно-последовательно протекающих реакций ( $r_i = k_1x_1^n$ ,  $r_{i+1} = k_2x_1^{n-1}$ ):

$$\varphi = 1/[1 + (k_2/k_1)x_1^{n-1}]. \quad (3.16)$$

Общая (интегральная) избирательность процесса  $\Phi$ :

$$\Phi = x_{1_k}/(x_{10} - x_{1_k}) = (x_i/\sum x_j)_k, \quad (3.17)$$

где  $x_{1_k}, \dots, x_{i_k}$  – конечные концентрации реагирующих веществ;  $x_1, x_i, x_j$  – текущие концентрации реагирующих веществ.

Общая избирательность химического процесса в непрерывно действующем РИВ имеет следующее выражение:

$$\Phi = -[1/(x_{1_0} - x_{1_k})] \int_{x_0}^{x_k} \phi dx_1, \quad (3.18)$$

которое справедливо при условии  $-r_1 = r_n + r_{n.p.}$ , где индексы «п» и «п.п» относятся к продукту и побочным продуктам соответственно.

Для непрерывно действующего РИС:

$$\Phi = \varphi \quad (3.19)$$

Выход продукта в химическом процессе  $\eta$  определяется как соотношение между концентрациями продукта  $x_n$  и реагирующих веществ  $x_{p.v}$

$$\eta = x_n/x_{p.v}. \quad (3.20)$$

В общем случае для параллельных и параллельно-последовательных реакций соотношение между выходом, степенью превращения и избирательностью химического процесса имеет вид:

$$\eta = f(x) \quad \text{и} \quad \eta = f'(x, \Phi). \quad (3.21)$$

Для процесса, протекающего в непрерывно действующем РИВ и в периодически действующем РИС, эта зависимость имеет вид:

$$\eta = -(1/x_0) \int_{x_0}^x \Phi dx = \int_0^x \Phi dx. \quad (3.22)$$

Если процесс проводится в непрерывно действующем РИС, связь между этими величинами выражается следующей зависимостью:

$$\eta = [x_n/(x_{p.v} - x)] \times [(x_{p.v} - x)/x_{p.v}] = \Phi(x_{p.v} - x)/x_{p.v} = \Phi x. \quad (3.23)$$

Для процесса, протекающего в каскаде, состоящем из РИС:

$$\eta = (1/x_0) \sum_{i=1}^n \Phi_i (x_i - x_{i-1}) = \sum_{i=1}^n \Phi_i x_i. \quad (3.24)$$

Термический к. п. д. ТО рекуперативного теплообмена равен отношению количества действительно переданного тепла в данном ТА к максимальному возможному количеству тепла, которое могло бы быть передано в бесконечно длинном ТА:

$$\eta_r = (Wc)_r (t_r^u - t_r^h)/(Wc)_{\min} (t_r^u - t_x^u) \quad \text{при} \quad (Wc)_{\min} = (Wc)_r \quad (3.25)$$

или

$$\eta_r = (Wc)_x (t_x^u - t_x^h)/(Wc)_{\min} (t_r^u - t_x^u) \quad \text{при} \quad (Wc)_{\min} = (Wc)_x. \quad (3.26)$$

где  $(Wc)_r$ ,  $[(Wc)_x]$  – водяной эквивалент горячего (холодного) потока, участвующего в операции теплообмена.

Можно показать, что к. п. д. ТА – это функция отношения

термических емкостей, или водяных эквивалентов:

$$R = (Wc)_{\min}/(Wc)_{\max} \quad (3.27)$$

и числа единиц переноса теплоты

$$N_r = hA/(Wc)_{\min} = \int_{t_x}^k dt/(t_r - t_x). \quad (3.28)$$

Величина к. п. д. ТА также зависит от направления движения потоков в нем. Например, термический к. п. д. для противоточного ТА равен:

$$\eta_r = \{1 - \exp[-N_r(1 - R)]\}/\{1 - R \exp[-N_r(1 - R)]\}. \quad (3.29)$$

Для других типов ТА значение к. п. д. можно получить, вводя корректирующий фактор  $-Y$ :

$$\eta_r = \{1 - \exp[-YN_r(1 - R)]\}/\{1 - R \exp[-YN_r(1 - R)]\}; \quad (3.30)$$

$$Y = \Delta t_{\text{истин}}/\Delta t_{\text{ср}}. \quad (3.31)$$

Корректирующий фактор позволяет также учесть изменение коэффициента теплопередачи по длине аппарата и гидродинамическую структуру потоков жидкостей. Фактор  $Y < 1$  и обычно определяется графически как функция входных и выходных температур и термических емкостей жидкостей.

Использование кпд упрощает задачу расчета неизвестных выходных температур и позволяет относительно легко анализировать сложные теплообменные подсистемы ХТС.

Для абсорбционных аппаратов ХТС в качестве кпд используют коэффициент извлечения, который равен:

$$\eta_a = (y_{hr} - y_{kr})/(y_{hr} - y_r^*), \quad (3.32)$$

где  $y_{hr}$  ( $y_{kr}$ ) – концентрация поглощаемого компонента в газе, поступающем в аппарат (выходящем из него);  $y_r^*$  – концентрация поглощаемого компонента в газе, которая равновесна со среднесарифметической концентрацией его в жидкости;

$$y_r^* = (y_{hr}^* + y_{kr}^*)/2; \quad (3.33)$$

$y_{hr}^*$  и  $y_{kr}^*$  – концентрации поглощаемого компонента в газе, равновесные с содержанием его в жидкости до и после аппарата; значения кпд  $\eta_a$  получают из уравнения материального баланса процесса абсорбции.

Кпд процесса десорбции определяют из уравнения материального баланса десорбции и выражают обычно в единицах жидкой фазы:

$$\eta_d = (x_{hjk} - x_{kkj})/(x_{hjk} - x_{kj}^*) \quad (3.34)$$

при

$$x_{kj}^* = (x_{hjk}^* + x_{kkj}^*)/2, \quad (3.35)$$

где  $x_{hjk}$  ( $x_{kkj}$ ) – концентрации поглощаемого компонента в жидкой фазе, поступающей в аппарат и выходящей из него;  $x_{kj}^*$  – концентрация поглощаемого

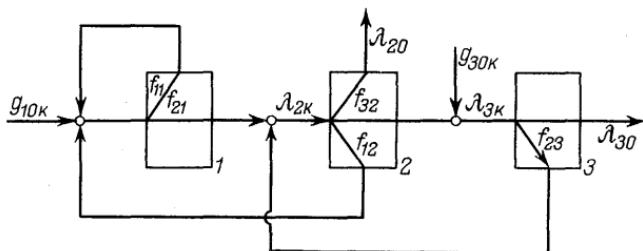


Рис. 3.9. Операторная схема ХТС с тремя технологическими операторами разделения

компонент в жидкой фазе, равновесная со среднеарифметической концентрацией его в газе;  $x_{ik}^*$  ( $x_{kk}$ ) – концентрации поглощаемого компонента в жидкости, равновесные с содержанием его в газе до и после аппарата.

При составлении систем уравнений МБ по массовым расходам некоторого  $i$ -го химического компонента (2.51) для ХТС целесообразно применять коэффициенты разделения входных потоков ТО. Рассмотрим ХТС, состоящую из трех ТО разделения (рис. 3.9), для каждого из которых известны значения крвп для  $k$ -го химического компонента – величины  $f_{ij(k)}$ . Система уравнений МБ по массовому расходу  $k$ -го компонента имеет вид:

$$\left. \begin{array}{l} g_{10(k)} + f_{11(k)} \lambda_{1k} + f_{12(k)} \lambda_{2k} = \lambda_{1k}; \\ f_{21(k)} \lambda_{1k} + f_{23(k)} \lambda_{3k} = \lambda_{2k}; \\ g_{30(k)} + f_{32(k)} \lambda_{2k} = \lambda_{3k}. \end{array} \right\} \quad (3.36)$$

Преобразуя СУ (3.36), получаем:

$$\left. \begin{array}{l} (1 - f_{11(k)}) \lambda_{1k} - f_{12(k)} \lambda_{2k} = g_{10(k)}; \\ -f_{21(k)} \lambda_{1k} + (1 - \lambda_{2k}) - f_{23(k)} \lambda_{3k} = 0; \\ -f_{32(k)} \lambda_{2k} + (1 - \lambda_{3k}) = g_{30(k)} \end{array} \right\} \quad (3.37)$$

где  $g_{10(k)}$  – массовый расход  $k$ -го компонента в потоке сырья, поступающем в  $i$ -й элемент ХТС;  $f_{ji(k)}$  –  $j$ -й крвп  $k$ -го компонента в  $i$ -ом элементе ХТС;  $\lambda_{ik}$  – общий массовый расход  $k$ -го компонента, поступающего в  $i$ -й элемент.

В соответствии с СУ (3.37) для ХТС, состоящей из  $m$  ТО, для которых известны величины крвп для каждого  $k$ -го компонента, СУ материального баланса по  $k$ -му компоненту будет иметь вид:

$$\left[ \begin{array}{cccc} 1 - f_{11(k)} & -f_{12(k)} & \cdots & -f_{1m(k)} \\ -f_{21(k)} & (1 - f_{22(k)}) & \cdots & -f_{2m(k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -f_{m1(k)} & -f_{m2(k)} & \cdots & (1 - f_{mm(k)}) \end{array} \right] \times \left[ \begin{array}{c} \lambda_{1k} \\ \lambda_{2k} \\ \vdots \\ \lambda_{mk} \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} g_{10(k)} \\ g_{20(k)} \\ \vdots \\ g_{m0(k)} \end{array} \right]. \quad (3.38)$$

### 3.5. МАТРИЦЫ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОПЕРАТОРОВ ХТС

Если при составлении системы уравнений ММ технологического оператора (1.2) использовать известные значения крвп, то СУ (1.2) можно представить в следующей матричной форме:

$$[Y_{m1}^j] = [R_{mn}^j] \times [X_{n1}^j], \quad (3.39)$$

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

Каждый элемент  $r_{mn}$  матрицы преобразования  $[R_{mn}]$  представляет собой некоторый крвп, величина которого не зависит от параметров входных потоков.

Рассмотрим в соответствии с определением понятия крвп (см. раздел 3.4) выражения для матриц преобразования ТО механического разделения, ТО селективного разделения и ТО химического превращения. Для ТО механического разделения матрица преобразования – это диагональная матрица:

$$[R_{nn}^*] = a [E_{nn}]. \quad (3.40)$$

где  $a$  – крвп;  $E_{nn}$  – единичная матрица.

Матричное уравнение (3.39) для каждого одного выходного потока ТО механического разделения имеет следующий вид:

$$[Y_{n1}] = a \times [E_{nn}] \times [X_{n1}]. \quad (3.41)$$

Для каждого одного выходного потока  $Y_{m1}$  ТО селективного, или диффузионного, разделения, отражающего четкое разделение смеси  $m$  компонентов в процессах ректификации, дистилляции, абсорбции и десорбции, матричное уравнение имеет следующий вид:

$$[Y_{m1}] = \begin{bmatrix} r_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & r_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{mm} \end{bmatrix} \times [X_{m1}], \quad (3.42)$$

где элементы матрицы  $r_{mm}$  не равны между собой и представляют различные крвп для отдельных компонентов.

Если в ТО химического превращения одновременно протекает  $z$  независимых реакций, то можно записать систему уравнений МБ химических компонентов:

$$\sum_{j=1}^k v_{ij} M_j = 0, \quad (3.43)$$

где  $v_{ij}$  – стехиометрический коэффициент  $j$ -го компонента в  $i$ -ой реакции;  $M_j$  – молекулярная масса  $j$ -го компонента;  $i = 1, z$  – число независимых реакций;  $j = 1, k$  – число компонентов, участвующих в реакции.

Стехиометрическая матрица  $[S_{zk}]$  системы уравнений (3.43) имеет вид:

$$[S_{zk}] = \begin{bmatrix} v_{11} & \dots & v_{1k} \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ v_{z1} & \dots & v_{zk} \end{bmatrix}. \quad (3.44)$$

Матричное уравнение, отображающее связь между векторами параметров входных и выходных технологических потоков ТОХП представляют в следующем виде:

$$[Y_{k1}] = \{[E_{kk}] + [S_{zk}]^T \times [\chi_{zk}]\} \times [X_{k1}], \quad (3.45)$$

где  $[E_{kk}]$  – единичная матрица;  $[\chi_{zk}]$  – матрица степеней превращения реагентов в химических реакциях;  $T$  – индекс транспонирования матрицы;

$$[R_{kk}] = \{[E_{kk}] + [S_{zk}]^T \times [\chi]\} - \quad (3.46)$$

матрица преобразования ТО химического превращения; матрица  $[R_{kk}]$  – недиагональная; элементы матрицы  $[R_{kk}]$  зависят от параметров ТО (см. раздел 3.4).

Пример 3.3. Задан ТОХП, в котором протекает реакция синтеза мочевины:  $\text{CO}_2 + 2\text{NH}_3 \rightarrow \text{CO}(\text{NH}_2)_2 + \text{H}_2\text{O}$ . Известна степень превращения  $\text{CO}_2$  в мочевину  $x_1$ . Обозначение химических компонентов:  $i = 1(\text{CO}_2)$ ;  $i = 2(\text{NH}_3)$ ;  $i = 3(\text{H}_2\text{O})$  и  $i = 4[\text{CO}(\text{NH}_2)_2]$ .

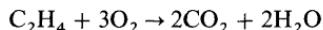
Необходимо для ТОХП составить матричное уравнение (3.45).

*Решение.* По определению составим матрицу  $[S_{zk}]^T$ :  $[S_{14}]^T = [1 \ -2 \ 1 \ 1]^T$ . Матрица степеней превращения имеет вид:  $[\chi_{14}] = [x_1 \ 0 \ 0 \ 0]$ . Матричное уравнение данного ТОХП:

$$\begin{bmatrix} Y_1 \\ Y_2 \\ Y_3 \\ Y_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} (1-x_1) & 0 & 0 & 0 \\ -2x_1 & 1 & 0 & 0 \\ x_1 & 0 & 1 & 0 \\ x_1 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix},$$

где  $x_i (y_i)$  – концентрация  $i$ -го компонента на входе (выходе) ТОХП.

Пример 3.4. Задан ТОХП, в котором протекают две параллельные реакции в присутствии инертного газа  $N_2$ :



Известна степень превращения по этилену  $x$  и избирательность для 1-й реакции  $\varphi$ . Обозначения компонентов  $i = 1(\text{C}_2\text{H}_4)$ ,  $i = 2(\text{C}_2\text{H}_4\text{O})$ ,  $i = 3(\text{CO}_2)$ ,  $i = 4(\text{O}_2)$ ,  $i = 5(\text{N}_2)$ ,  $i = 6(\text{H}_2\text{O})$ .

Необходимо составить матрицу преобразования для ТОХП (3.46).

*Решение.* Составим стехиометрическую матрицу

$$[S_{26}] = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 2 & -3 & 0 & 2 \end{bmatrix}.$$

Матрица степеней превращения с учетом значения избирательности  $\varphi$  [ $x_1 = \varphi x$ ;  $x_2 = (1 - \varphi)x$ ] имеет вид:

$$x_{26} = \begin{bmatrix} x_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Матрица преобразования для данного ТОХП может быть записана следующим образом:

$$[R_{66}] = \begin{bmatrix} 1 - (x_1 + x_2) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ x_1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2x_2 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2}x_1 - 3x_2 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 2x_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Рассмотрим процедуру построения матрицы преобразования  $[R]$  (3.46) для ТОХП, в котором протекает сложная реакция, вводя в СУ материального баланса новых оптимизирующих, или управляющих ИП. Ввод в СУ новых управляющих ИП позволяет линеаризовать эту СУ, а нелинейные члены перенести в выражение для расчета КЭ.

Пусть в РИВ протекает обратимая реакция:



Если в момент времени  $t$  степень превращения вещества  $A$   $x((t))$  известна, то концентрации веществ  $A, B, C, D$  (соответственно  $z_A, z_B, z_C, z_D$ ) определяются из следующих соотношений:

$$\left. \begin{array}{l} z_A(t) = z_A(0)[1 - x(t)]; \\ z_B(t) = z_B(0) - (v_2/v_1)x(t)z_A(0); \\ z_C(t) = z_C(0) - (v_3/v_1)x(t)z_A(0); \\ z_D(t) = z_D(0) + (v_4/v_1)x(t)z_A(0). \end{array} \right\} \quad (3.48)$$

Для входных ( $x_i$ ) и выходных ( $y_i$ ) переменных реактора выполняются соотношения:

$$\left. \begin{array}{l} z_A(0) = x_1; \quad z_B(0) = x_2; \quad z_C(0) = x_3; \quad z_D(0) = x_4; \\ z_A(\tilde{t}) = y_1; \quad z_B(\tilde{t}) = y_2; \quad z_C(\tilde{t}) = y_3; \quad z_D(\tilde{t}) = y_4, \end{array} \right\} \quad (3.49)$$

где  $\tilde{t}$  – соответствует длине реактора.

Из соотношений (3.48) и (3.49) получают

$$\left. \begin{array}{l} y_1 = (1 - \tilde{x})x_1; \quad y_2 = x_2 - (v_2/v_1)\tilde{x}x_1 \\ y_3 = x_3 + (v_3/v_1)\tilde{x}x_1; \quad y_4 = x_4 + (v_4/v_1)\tilde{x}x_1; \\ \tilde{x} = \kappa(t) = (z_1(\tilde{t}) - z_1(0))/z_1(0). \end{array} \right\} \quad (3.50)$$

Введем в качестве новой управляющей переменной величину  $\tilde{x}$ . Тогда матрица преобразования для реактора  $[R]$  будет иметь вид:

$$[R] = \begin{bmatrix} (1 - \tilde{x}) & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{v_2}{v_1}\tilde{x} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{v_3}{v_1}\tilde{x} & 0 & 1 & 0 \\ \frac{v_4}{v_1}\tilde{x} & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.51)$$

Используя математическую модель РИВ, нетрудно получить уравнение следующего вида:

$$\tilde{t} = \Phi[\tilde{x}, x_1, x_2, x_3, x_4, T], \quad (3.52)$$

где  $T$  – температура.

Поскольку длина реактора  $\tilde{t}$ , как правило, входит в выражение КЭ, то заменив величину  $\tilde{t}$  на ее выражение из формулы (3.52), получают, что КЭ нелинейным образом зависит от переменных  $\tilde{x}, x_1, x_2, x_3, x_4, T$ . Как видим, с введением новой управляющей переменной  $\tilde{x}$  ММ реактора стала линейной (3.51), а нелинейность перешла в КЭ. Данный метод не обладает универсальностью, так как для каждого вида ТОХП необходимо каждый раз проводить специальные преобразования СУ.

Метод определения значений крив или элементов матриц преобразования ТО на основе решения СУ математических моделей ХТП, являющийся весьма трудоемким, не всегда можно использовать на практике при разработке математической модели

ли ХТС в целом. Для определения значений элементов матриц преобразования ТО, описываемых сложными математическими моделями, наиболее целесообразно применять методы планирования эксперимента на математической модели данного ТО, отображающей физико-химическую сущность ХТП. Использование методов планирования эксперимента на ММ позволяет существенно сократить расчетные процедуры при математическом моделировании ХТС и получить достаточно точные корректные результаты в заданном диапазоне изменения параметров входных ТП.

Построение линейных регрессионных уравнений, входящих в упрощенные матричные уравнения ТО (3.39), осуществляют с использованием планов первого порядка, к которым относятся ПФЭ и ДФЭ (см. раздел 2.2). Однако для ХТП, имеющих существенно нелинейные ММ, необходимо принять кусочно-линейную аппроксимацию для исходной ММ. В результате кусочно-линейной аппроксимации данный ТО отображается набором различных матриц преобразования.

Использование ПФЭ и ДФЭ при определенных допущениях на диапазон варьирования значений входных переменных  $[X_{n1}]$  позволяет получить следующее матричное уравнение для любого ТО:

$$[Y_{m1}] = [\tilde{R}_{mn}] \times [X_{n1}] + [X_{m1}^0], \quad (3.53)$$

где  $[Y_{m1}]$  ( $[X_{n1}]$ ) – матрица-столбец выходных (входных) переменных;  $[\tilde{R}_{mn}]$  – матрица преобразования с элементами  $a_i$ , являющимися коэффициентами уравнения (2.36);  $[X_{m1}^0]$  – матрица-столбец свободных членов уравнения (2.36).

Если каждому  $i$ -ому элементу ХТС соответствует определенная  $i$ -я матрица преобразования  $[R_i]$ , то матричное уравнение ХТС в целом будет включать некоторую эквивалентную матрицу преобразования ХТС  $[R^*]$ , которая зависит от матриц преобразования отдельных элементов  $[R_1], \dots, [R_N]$ , входящих в структуру ХТС:

$$[Y] = [R^* \{ [R_1], [R_2], \dots, [R_N], [X_1], \dots, [X_n], [Y_1], \dots, [Y_n] \}] \times [X], \quad (3.54)$$

где  $[X]$  ( $[Y]$ ) – матрица-столбец параметров входных (выходных) технологических потоков ХТС;  $[R^*]$  – эквивалентная матрица преобразования ХТС;  $[R_i]$  – матрица преобразования;  $[X_i]$  ( $[Y_i]$ ) – матрицы-столбцы параметров входного (выходного) ТП  $i$ -го элемента ХТС;  $i = \overline{1, N}$  – число элементов ХТС.

Для получения эквивалентной матрицы преобразования ХТС  $[R^*]$  необходимо по структурной схеме ХТС построить структурно-топологическую модель ХТС (см. раздел 1.8) в виде матричной структурной блок-схемы ХТС.

*Матричная блок-схема* (МБС) ХТС – это графическое представление ММ данной системы в виде соединений определенных совокупностей матричных блоков, условно обозначаемых двой-

ными прямоугольниками и соответствующими матрицам преобразования каждого ТО между его одним входным и одним выходным технологическим потоком (рис. 3.10, *a*). Соединения между отдельными матричными блоками на МБС изображаются двойными направленными линиями векторов, каждый из которых отображает вектор параметров входных, промежуточных и выходных ТП системы.

Кроме матричных блоков и векторов в структуру МБС входят два вида узлов: узел алгебраического суммирования векторов, которому соответствует матричное уравнение  $[Y] = [X_1] \pm [X_2]$  (рис. 3.10, *б*), и узел размножения вектора, которому соответствует уравнение  $[X] = [X_1] = \dots = [X_n]$  (см. рис. 3.10, *в*).

При построении МБС используются следующие предпосылки: все матрицы-столбцы векторов параметров технологических потоков имеют одинаковую размерность ( $n \times 1$ ), а исходная матрица преобразования (3.39) между каждым входным и выходным технологическим потоком любого ТО в соответствии с видом регрессионного уравнения записывается следующим образом (см. рис. 3.10, *г*):

$$[X_{n1}] = [\tilde{R}_{nn}] \times [Y^0] + [Y_{n1}], \quad (3.55)$$

где  $[X_{n1}]$  ( $[Y_{n1}]$ ) – матрица-столбец параметров входного (выходного) ТП;  $[\tilde{R}_{nn}]$  – основная матрица преобразования элемента ХТС;  $[Y^0]$  – матрица-столбец, соответствующая нулевым членам линейного регрессионного уравнения.

Все преобразования МБС на основе аппарата матричного исчисления, необходимые для получения  $[R^*]$  ХТС в целом, осуществляют с использованием правил эквивалентного преобразования МБС, которые могут быть полностью алгоритмизированы для автоматического выполнения на ЭВМ (см. раздел 5.4).

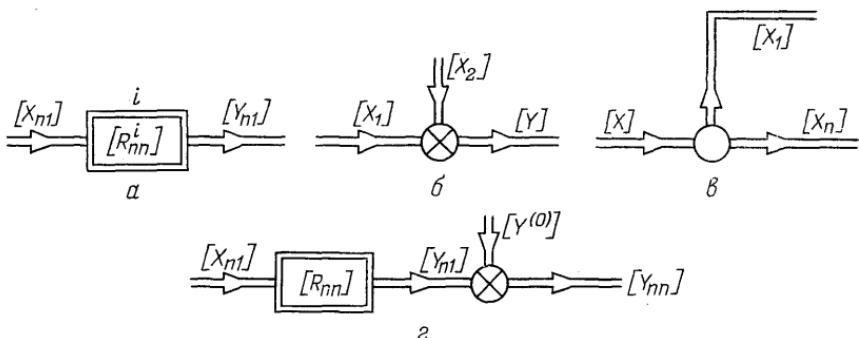


Рис. 3.10. Графическое изображение основных элементов матричной блок-схемы ХТС:

*а* – матричный блок; *б* – узел алгебраического сложения векторов; *в* – узел размножения вектора; *г* – матричное изображение технологического оператора, которое соответствует виду линейных регрессионных уравнений

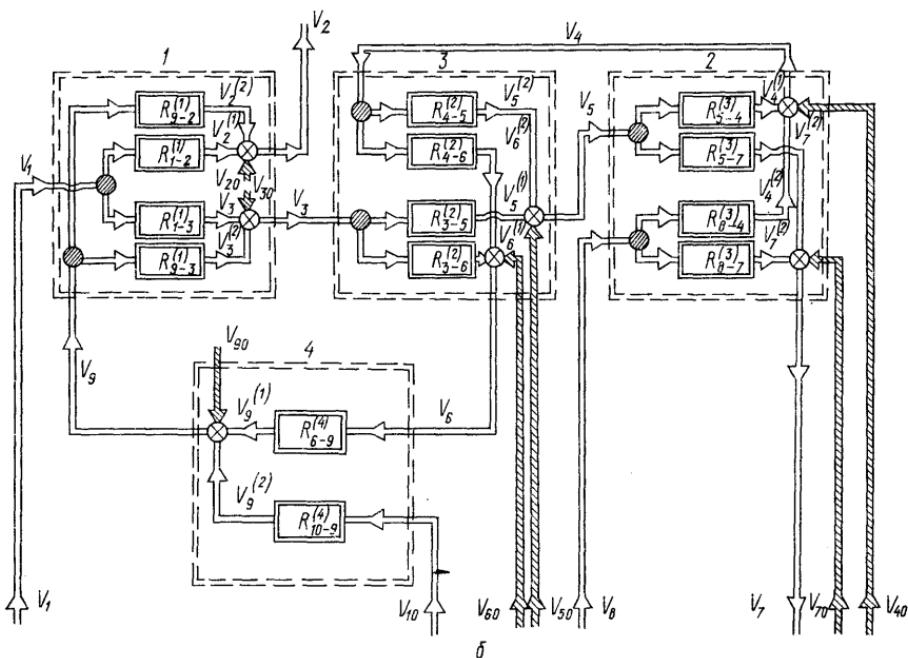
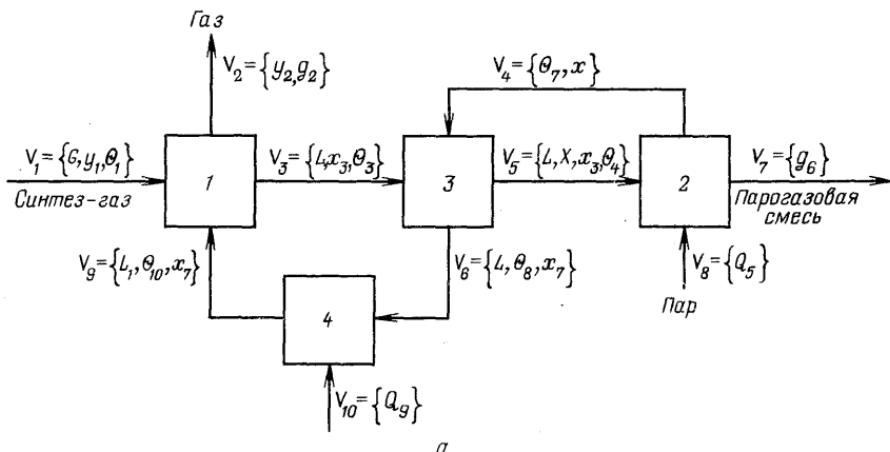


Рис. 3.11. Структурная схема (a) и матричная блок-схема (б) абсорбционно-десорбционной ХТСmonoэтаноламиновой очистки синтез-газа от  $\text{CO}_2$  в производстве аммиака:

1 – абсорбер; 2 – десорбер; 3 – теплообменник; 4 – холодильник

Для абсорбционно-десорбционной ХТС monoэтаноламиновой очистки синтез-газа от  $\text{CO}_2$  в производстве аммиака, структурная схема которой изображена на рис. 3.11, a; матричная блок-схема системы показана на рис. 3.11, б. Параметры ТП обозначены:

$G$  – расход очищаемого синтез-газа;  $L$  – кратность циркуляции раствора абсорбента –monoэтаноламина;  $\bar{x}$  – концентрация абсорбента;  $x_3, x_7$  – концентрации активной части абсорбента в насыщенном и регенерированном растворах;  $g_2, g_6$  – потери абсорбента в абсорбере и десорбере;  $Q_5, Q_9$  – параметры состояния ТП пара и охлаждающей воды;  $t_1$  – температура синтез-газа на входе в абсорбер;  $\theta_3, \theta_4, \theta_7, \theta_8, \theta_{10}$  – температуры соответствующих ТП раствора абсорбента.

Исходные матрицы преобразования технологических операторов ХТС, полученные на основе статистических испытаний методом ПФЭ на математических моделях отдельных элементов системы имеют следующий вид:

для абсорбера 1

$$\begin{bmatrix} y_2 \\ g_2 \\ \vdots \\ x_3 \\ \theta_3 \\ \vdots \\ a_{41} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{16} & | & a_{17}^0 \\ \vdots & & \vdots & | & \vdots \\ \vdots & & \vdots & | & \vdots \\ \vdots & & \vdots & | & \vdots \\ \vdots & & \vdots & | & \vdots \\ a_{41} & \cdots & a_{46} & | & a_{47}^0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G_1 \\ y_1 \\ \theta_1 \\ L \\ x_7 \\ \theta_{10} \\ 1 \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{16} \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ a_{41} & \cdots & a_{46} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G \\ y_1 \\ \theta_1 \\ L \\ x_7 \\ \theta_{10} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} a_{17}^0 \\ a_{27}^0 \\ 0 \\ a_{37} \\ a_{47}^0 \end{bmatrix};$$

для десорбера 2

$$\begin{bmatrix} g_6 \\ x_7 \\ \theta_7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \theta_{11} & \cdots & \theta_{15} \\ \theta_{21} & \cdots & \theta_{25} \\ \theta_{31} & \cdots & \theta_{35} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} L \\ x \\ x_3 \\ \theta_4 \\ \hline Q_5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \theta_{16}^0 \\ \theta_{26}^0 \\ 0 \\ \theta_{36} \end{bmatrix},$$

для теплообменника 3

$$\begin{bmatrix} \theta_4 \\ \theta_8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} L \\ \theta \\ \hline \theta_7 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} d_{14}^0 \\ d_{24}^0 \end{bmatrix};$$

для холодильника 4

$$[\theta_{10}] = [c_{11} \ c_{12} \ c_{13}] \times \begin{bmatrix} L \\ \theta_8 \\ Q_9 \end{bmatrix} + [c_{14}^0] .$$

По исходным матрицам преобразования элементов ХТС запишем с учетом правил построения МБС вид матричных уравнений для матричных блоков (см. рис. 3.10, *г*), отображающих на МБС (см. рис. 3.11, *а*) абсорбер *1* и холодильник *4*:

для абсорбера I

$$[V_{2-1}] = \begin{bmatrix} y_2 \\ g_2 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & | & G_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & | & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & | & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} y_1 \\ \theta_1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$[V_{2-9}] = \begin{bmatrix} y_2 \\ g_2 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{14} & a_{15} & a_{16} & | & \\ a_{24} & a_{25} & a_{26} & | & 0 \\ \hline 0 & & 0 & | & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} G \\ y_1 \\ \theta_1 \\ 0 \end{bmatrix};$$

$$[V_{3-1}] = \begin{bmatrix} x_3 \\ \theta_3 \\ \vdots \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \left[ \begin{array}{ccc|c} a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & 0 \\ \hline & & 0 & 0 \end{array} \right] \times \begin{bmatrix} G \\ y_1 \\ \theta_1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

$$[V_{3-9}] = \begin{bmatrix} x_3 \\ \theta_3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{34} & a_{35} & a_{36} & | & 0 \\ a_{44} & a_{45} & a_{46} & | & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} L_7 \\ x_7 \\ \theta_{10} \\ 0 \end{bmatrix};$$

$$[V_3^0] = \begin{bmatrix} a_{37} \\ a_{47} \end{bmatrix};$$

для холодильника 4

$$[V_{9-6}] = \begin{bmatrix} L \\ x_7 \\ \theta_{10} \\ 0 \end{bmatrix}_{(4 \times 1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & | & 0 \\ 0 & 1 & 0 & | & 0 \\ c_{11} & 0 & c_{12} & | & 0 \\ 0 & 0 & 0 & | & 0 \end{bmatrix}_{(4 \times 4)} \times \begin{bmatrix} L \\ x_7 \\ \theta_8 \\ 0 \end{bmatrix}_{(4 \times 1)};$$

$$[V_{9-10}] = \begin{bmatrix} L \\ x_7 \\ \theta_{10} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ c_{13} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} Q_9 \\ 0 \end{bmatrix};$$

$$[V_9^0] = [c_{14}^0].$$

Чтобы выполнить операции эквивалентного преобразования МБС с целью определения  $[R^*]$  ХТС в целом, исходную МБС можно представить в упорядоченной форме, которая позволяет легко выделять типовые связи между матричными блоками (последовательные, параллельные и обратные). Для рассмотренной абсорбционно-десорбционной ХТС (см. рис. 3.11, а) упорядоченная МБС представлена на рис. 3.12.

### 3.6. ОСНОВНЫЕ ЭТАПЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И АНАЛИЗА ДЕЙСТВУЮЩИХ ХТС

Решение разнообразных задач математического моделирования и анализа действующих ХТС методологически осуществляют по следующим шести основным этапам:

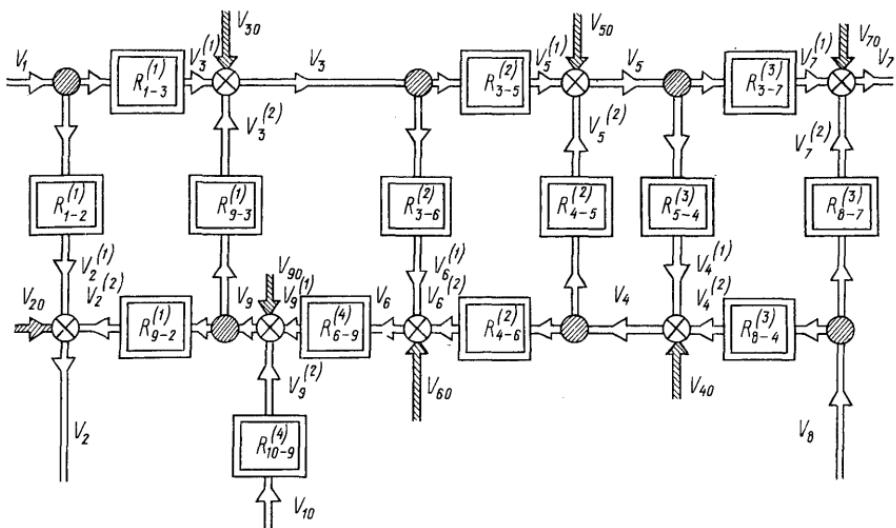


Рис. 3.12. Упорядоченная матричная блок-схема абсорбционно-десорбционной XTC моноэтаноламиновой очистки синтез-газа

1) постановка задачи – сформулировать инженерно-техническую постановку задач анализа XTC, которые необходимо решать с использованием вычислительного эксперимента на ММ; определить, с какой точностью требуется получить решение задач математического моделирования и анализа XTC;

2) изучение физико-химической сущности XTP, входящих в структуру XTC – выявить конструкционные и технологические параметры XTP, оказывающие существенное влияние на себестоимость продукции; собрать данные по материальному и тепловому балансам, режимам эксплуатации и о функционировании АСУ ТП. На основе технологической схемы XTC составить логико-информационную схему, составить приближенные математические модели XTP, если такие модели еще не входят в библиотеку модулей расчета XTP; эти приближенные модели должны соответствовать реальным технологическим режимам эксплуатации XTC;

3) разработка математической модели основного варианта технологического режима XTC и анализ чувствительности XTC – создать ММ действующего основного варианта XTC с единым набором технологических параметров; выявить такие XTP и параметры, которые оказывают наименьшее влияние на основной вариант режима эксплуатации, а также найти параметры XTP, оказывающие наибольшее влияние на переменные, которые представляют интерес с точки зрения целей анализа XTC;

4) анализ затрат ресурсов на математическое моделирование ХТС – необходимо сопоставить цели математического моделирования и анализа ХТС с наличием имеющегося персонала исследователей, средств вычислительной техники и времени; проанализировать требуемую точность расчета ХТС, которая может быть достигнута с использованием модулей расчета ХТП, обладающих наибольшей чувствительностью; в случае необходимости составить план сбора экспериментальных данных, проводя лабораторные и производственные измерения; решить, насколько общими (в противоположность частным) должны быть ММ, и установить способ обработки физико-химических параметров, основываясь на этих решениях; разработать более общие модули расчета ХТП и новую логико-информационную схему ХТС с целью более точного описания режимов реальных ХТП и аппаратов; разработать алгоритм стратегии анализа ХТС и алгоритмы ускорения сходимости численных расчетов СУ математических моделей, с тем чтобы удовлетворялась вся система заданных ограничений и соблюдались материальный и энергетический балансы для всех возможных технологических режимов ХТС;

5) разработка модулей расчета параметров и состояний ХТП; разработка математической модели ХТС в целом.

6) проведение вычислительного эксперимента на ЭВМ с математической моделью ХТС для получения результатов анализа функционирования отдельных технологических блоков, агрегатов и узлов с последующим анализом производства (установки) в целом.

Рассмотрим более подробно характеристику некоторых операций основных этапов математического моделирования и анализа действующих ХТС. На этапе постановки задачи необходимо оценить, насколько сложными должны быть модули расчета (МР) отдельных ХТП, предназначенные для поиска решений поставленных инженерно-технологических задач; насколько велико число однотипных МР для всей ХТС, причем требуется оценить эту величину не только для отдельного основного варианта технологического режима ХТС, но и для всех исследуемых вариантов. Но чем сложнее оказываются отдельные МР, тем меньше возможности моделирования полной ХТС. На вопросы, касающиеся отдельного ХТП или элемента ХТС, можно ответить, применяя вычислительный эксперимент на конкретной сложной ММ, описывающей этот ХТП, тогда как для ответа на вопросы о функционировании ХТС в целом приходится использовать более простые МР. Тем не менее, если химическое производство состоит из сложных ХТП, можно применять широко информационные МР этих аппаратов для получения с помощью методов планирования эксперимента упрощенных МР, которые будут использованы в ММ производстве.

Необходимо дать предварительную оценку требований, кото-

рые предъявляются к математической модели ХТС: 1) четкое формулирование целей исследования; 2) применение на начальном этапе простых МР аппаратов, позволяющих установить необходимый уровень точности вычислительного эксперимента; 3) наличие достоверных и (или) необходимых производственных данных; 4) наличие данных о физических и химических свойствах веществ и смесей, перерабатываемых в ХТС.

На этапе изучения ХТП, входящих в структуру ХТС, необходимо при составлении списка параметров ТП выполнить следующие условия:

1) информация должна соответствовать целям, поставленным перед моделированием. Иногда полезно предвидеть требования, которые могут быть предъявлены к ММ в дальнейшем, но список не должен быть излишне подробным. Во многих случаях химические компоненты можно распределять на группы, а этим группам следует приписывать такие средние молекулярные веса, чтобы сходился МБ. Как правило, компоненты обратных ТП являются наиболее важными, так как они существенно влияют на эффективность ХТС;

2) список должен включать также химические компоненты, которые непосредственно не влияют на цели моделирования, но тесно связаны с основными компонентами, перерабатываемыми в ХТС;

3) видоизменение информации о входных ТП может описываться с одинаковой точностью во всех МР. Состояние знаний об основных явлениях, происходящих в рассматриваемом аппарате, может оказаться недостаточным для описания работы аппарата с требуемой точностью;

4) выбрать рациональные единицы измерения параметров ТП, а в качестве информационных переменных на МР выбрать те, которые отвечают на поставленные вопросы, являются основными компонентами в обратных ТП и наиболее точно рассчитываются в МР.

Требования, предъявляемые к информации о физических и химических свойствах веществ, о химическом равновесии и выходах реакций, о степенях превращения и кинетических параметрах ХТП, также зависят от целей моделирования ХТС. Конечно, если не нужно составлять тепловой баланс, то не нужно знать и значения удельной теплоемкости. Однако обычно необходимо знать теплоемкость, плотность и основные данные о равновесной концентрации, поэтому в приближенных МР эти свойства можно принять постоянными. На основании знаний и практического опыта необходимо выявить ТО, играющие особенно важную роль в функционировании ХТС.

Как показывает опыт, при математическом описании ТО химического превращения возможно использовать достаточно простые описания механизмов реакций и с их помощью рассчи-

тать константы скорости на основе измеренных значений степени превращения, полученных в производственных условиях. Кроме того, основные химические компоненты важно выбрать так, чтобы МР реактора давал его адекватное описание при изменении технологических режимов.

Основные химические компоненты в списке потоков должны быть рассчитаны с достаточной точностью на основании производственных данных, которые требуется многократно проверять различными способами. В случае несоответствия расчетных и производственных данных точность измерений следует оценивать повторно. Если данные нельзя оценить независимыми измерениями, то необходимо проверить расположение и калибровку контрольно-измерительных приборов (КИП).

Поскольку параметры ТП в большинстве ХТС непрерывно изменяются под влиянием возмущений в потоке питания или условий окружающей среды, полный набор данных должен быть получен либо после работы производства при тщательном наблюдении и контроле в течение времени, достаточного для достижения стационарного состояния, либо усреднением данных, полученных за определенный период времени при нормальной работе производства. Во всех случаях данные должны быть приведены в соответствие с материальным и тепловым балансами ХТС.

Если предварительных измерений не производилось, а установление измерительного прибора приводит к значительному нарушению режима работы, то ТП, который важен для моделирования, можно рассчитать косвенно по СУ материально-теплового баланса или найти по косвенным измерениям.

Исходная ЛИНС должна включать простые и приближенные МР отдельных элементов ХТС.

На этапе разработки математической модели основного варианта технологического режима ХТС и анализа чувствительности используются приближенные, или упрощенные МР отдельных ТО, чтобы с заданной точностью рассчитать материально-тепловой баланс для одного набора совместимых производственных данных. Затем необходимо изучить функционирование ХТС в условиях, которые отличны от условий основного варианта технологического режима. Используя приближенную модель ХТС, проводят анализ чувствительности ХТС во всем диапазоне изменения параметров технологических режимов, отвечающим поставленным целям анализа.

Для моделирования ХТС определяют такой набор технологических параметров для модулей расчета ХТП (значения крвп для ТО, концентрации веществ, кппд ХТП), который позволяет получить значения параметров ХТП, измеренных в производственных условиях и соответствующих основному варианту технологического режима ХТС. Это позволяет быстро установить точность

и соответствие имеющихся производственных данных, выявить необходимые данные, наметить испытания и определить ТП и содержащуюся в них информацию. Необходимо определить, какие параметры могут быть измерены.

При моделировании ХТС необходимо разработать операции контроля и управления вычислительными процедурами, которые позволяют достичь реальных решений, определить начальные значения для параметров обратных ТП, последовательность расчетов ТО при анализе ХТС, рассмотреть вопрос о применении быстродействующих алгоритмов численных расчетов. После установления основного варианта ХТС технологические параметры ХТП и параметры ТП существенно изменяют по сравнению с их значениями, соответствующими основному варианту ХТС. Осуществляя вариации этих параметров, анализируют чувствительность ХТС, выявляя относительную роль каждого блока и каждой переменной.

Вычислительный эксперимент с приближенной моделью позволяет разработать алгоритмы стратегии анализа ХТС и выбрать алгоритмы численного расчета СУ математических моделей ХТС. Приближенное моделирование ХТП с использованием линейных моделей имеет свои ограничения. Нелинейность в реальных ХТП и их взаимное влияние могут привести к значительным эффектам, которые в линейных приближенных моделях не проявляются. В простых МР не учитывается взаимодействие явлений переноса тепла и массы в ХТП и сделанные упрощающие предположения могут ограничить достоверность результатов.

Выделим те МР, точность которых требуется повысить, если нужно ответить на вопросы о функционировании ХТС в условиях, сильно отличающихся от условий основного варианта.

Поскольку модели ХТП должны точно предсказывать их функционирование при параметрах, значительно отличающихся от параметров основного варианта, необходимо иметь более одного набора производственных данных. Модели должны давать правильные ответы в диапазоне условий, изучаемых с использованием математического моделирования, и точно предсказывать влияние ключевых компонентов списка параметров потока.

Математическое описание некоторых аппаратов может быть основано на фундаментальных данных; при этом потребность в обширных производственных данных не играет решающей роли. Однако для других аппаратов такой информации недостаточно, и для разработки достоверных моделей нужны экспериментальные данные. Это особенно справедливо по отношению к реакторам из-за неопределенности активности катализатора, механизмов реакций и гидродинамики. Полезные результаты часто можно получить, исходя из упрощенных механизмов реакций. Но для определения параметров, констант скорости, энергии

активации и для выбора наиболее вероятных механизмов требуются производственные данные.

Разработка МР для отдельных ХТП подразделяется на следующие операции: 1) выбор типа модели и формулировка ограничений; 2) запись уравнений с учетом допущений; 3) получение данных, необходимых для решения уравнений; 4) выбор метода численного решения уравнений. Составление программы проверки адекватности созданного МР реальному ХТП.

В результате решения на ЭВМ задачи анализа действующей ХТС исследователь может: определить значения технологических критериев эффективности ХТС – расходных норм по сырью и ТЭР (греющий пар, охлаждающая вода, электроэнергия); проанализировать эффективность способов рекуперации сырья и энергии, использованных в данной ХТС; определить значения расходов вещества и энергии в выбросах, отходящих в окружающую среду, и разработать способы их устранения; проанализировать принципы использования вторичных материальных и энергетических ресурсов данной ХТС; проанализировать принципы организации водоснабжения ХТП.

На основе этих результатов исследователь должен предложить инженерно-технологические и организационно-технические рекомендации по повышению эффективности ХТС: способы снижения расходных норм сырья и ТЭР; способы интенсификации ХТП и увеличения к. п. д. отдельных ХТП; способы рекуперации вторичных материальных и энергетических ресурсов; способы организации замкнутого водооборотного цикла; разработать мероприятия по улучшению условий охраны окружающей среды. Необходимо выполнить технико-экономическое обоснование реализации указанных рекомендаций на действующем производстве.

### **3.7. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ**

В.3-1. В чем различие понятий информационной переменной и информационного потока ХТС?

В.3-2. Как изображаются на логико-информационной схеме ХТС математические модели элементов, параметры элементов и параметры технологических потоков ХТС?

В.3-3. Как с помощью ЛИНС определить локальные степени свободы элементов ХТС и степень свободы ХТС в целом?

В.3-4. Сформулируйте понятия базисной и выходной информационной переменной СУ математической модели ХТС.

В.3-5. Каким условиям должен удовлетворять набор выходных информационных переменных СУ?

В.3-6. Чем различаются совместно разомкнутые и совместно замкнутые СУ?

В.3-7. Какие методы используются для разработки стратегии решения информационно разреженных СУ математических моделей ХТС?

В.3-8. Что такое алгоритм оптимальной стратегии решения СУ?

В.3-9. Какие трудности возникают при использовании метода Гаусса для решения многомерных СЛУ с разреженными матрицами?

В.3-10. Что такое модуль расчета ХТП? Чем различаются модуль расчета состояний и модуль расчета параметров ХТП?

В.3-11. Назовите основные признаки классификации модулей расчета ТО или ХТП.

В.3-12. Что такое библиотека модулей расчета ТО?

В.3-13. Назовите классы модулей расчета состояний ТО по признаку общности назначения, или специализации.

В.3-14. Назовите классы модулей расчета ТО по признаку информационности.

В.3-15. Дайте содержательное описание операций переработки информации и назовите показатели информационности расширенно информационных модулей расчета параметров ТО химического превращения и диффузионного разделения, отображающего процесс ректификации в простой колонне.

В.3-16. Чем различаются показатели информационности минимально, широко и расширенно информационных модулей расчета состояний ТО диффузионного разделения, соответствующих простым ректификационным колоннам?

В.3-17. Дайте определения коэффициента разделения входных потоков и кпд для элементов ХТС.

В.3-18. Чему равны кпд теплообменника, абсорбера и десорбера ХТС?

В.3-19. Что такое матрица преобразования элемента ХТС?

В.3-20. Какую структурно-топологическую модель ХТС необходимо использовать для определения эквивалентной матрицы преобразования ХТС в целом?

В.3-21. Сформулируйте основные правила построения матричных блок-схем ХТС.

В.3-22. Назовите основные этапы методологии решения задач математического моделирования и анализа действующих ХТС.

В.3-23. Какие основные операции необходимо выполнить при изучении физико-химической сущности ХТП и технологической схемы ХТС?

В.3-24. Сформулируйте сущность основных операций разработки математической модели основного варианта технологического режима ХТС и анализа чувствительности ХТС.

В.3-25. Каким образом показатели точности модулей расчета отдельных ТО влияют на оценку точности математического моделирования ХТС?

3.3-1. Для матричной блок-схемы абсорбционно-десорбционной ХТС, которая изображена на рис. 3.19, а, с учетом правил построения МБС записать матричные уравнения для матричных блоков, отображающих десорбер 2 и теплообменник 3.

3.3-2. Составьте выражения для матриц преобразования ТО диффузионного разделения и ТО химического превращения, если векторы параметров их входных и выходных ТП будут представлены матрицами-строками. Сравните, чем отличаются полученные новые выражения от выражений (3.42) и (3.45) соответственно.

3.3-3. Нарисуйте логико-информационную схему для математической модели процесса ректификации, составленной с использованием трехдиагональной матрицы.

3.3-4. Нарисуйте обобщенную блок-схему методологии решения задач математического моделирования и анализа действующих ХТС, которая изложена в разделе 3.6.

3.3-5. Запишите систему уравнений для минимально информационного МРП колонн ректификации, которая включает уравнение Антуана для расчета давления паров чистых компонентов, уравнения Фенске – Андервуда – Джиллилена для расчета минимального и действительного флегмового чисел, а также минимального и действительного чисел теоретических тарелок РК; составьте уравнения материального и теплового балансов РК. Нарисуйте обобщенную и развернутую ЛИНС для минимально информационного МРП колонны ректификации.

3.3-6. Нарисуйте обобщенные ЛИНС для расширенно и широко информационного МРС колонн ректификации МКС.

3.3-7. Нарисуйте ЛИНС для действующего узла ректификации, включающего простую колонну ректификации, дефлегматор-конденсатор и куб-испаритель. Для

каждого элемента узла ректификации используйте минимально информационные МРС.

3.3-8. Используя матрицы преобразования элементов абсорбционно-десорбционной ХТС (см. рис. 3.11, а): абсорбера, теплообменника, десорбера и холодильника, определите локальную степень свободы ХТС; составьте развернутую логико-информационную схему данной ХТС.

## Глава 4

# ПРИНЦИПЫ ПОСТРОЕНИЯ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ХТС

## 4.1. КЛАССИФИКАЦИЯ И НАЗНАЧЕНИЕ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ ХТС

Большая сложность технологической топологии современных проектируемых и действующих ХТС, многомерность ХТС как по числу составляющих их элементов, так и по числу выполняемых ими функций, высокая степень параметрического взаимовлияния элементов обуславливают возникновение при решении задачи анализа, оптимизации и синтеза ХТС ряда принципиальных трудностей методологического и вычислительного характера. Эти трудности можно в значительной мере преодолеть, применяя топологические модели (графы) ХТС.

Для решения задач математического моделирования, анализа и оптимизации ХТС применяют четыре класса топологических моделей ХТС: 1) потоковые графы, 2) информационно-потоковые графы, 3) сигнальные графы и 4) структурные графы.

Потоковые графы (ПГ) отображают особенности технологической топологии системы и позволяют устанавливать непосредственную взаимосвязь между изменениями технологической топологии и количественными характеристиками состояния ХТС при определенных входных воздействиях на систему. Выделяют четыре группы потоковых графов ХТС: параметрические потоковые графы (ППГ), материальные потоковые графы (МПГ), тепловые потоковые графы (ТПГ) и эксергетические потоковые графы (ЭСПГ).

ППГ применяют для разработки алгоритмов оптимальной стратегии расчета ХТС при технологически направленном способе анализа сложных многоконтурных ХТС (см. разделы 2.5 и 6.1). МПГ используют для автоматизированного составления систем уравнений материальных балансов ХТС, ТПГ и ЭСПГ применяют для автоматизированного составления систем уравнений теплового и эксергетического балансов ХТС (см. разделы 2.6, 2.7 и 5.1).

Информационно-потоковые графы (ИПГ) отображают особенности информационной структуры систем уравнений математических моделей ХТС. Выделяют две группы ИПГ: двудольные информационные графы (ДИГ) и информационные графы (ИГ).

Информационно-потоковые графы применяют для разработки алгоритмов оптимальной стратегии решения информационно разреженных совместно замкнутых систем уравнений математических моделей ХТС (см. разделы 3.2 и 6.2).

Сигнальные графы (СГ) отображают причинно-следственные связи между переменными и параметрами линейных систем уравнений математических моделей ХТС. СГ применяют для разработки быстродействующих алгоритмов и решения многомерных СЛУ, а также для расчета показателей устойчивости, чувствительности и надежности ХТС (см. разделы 1.7 и 5.3).

Структурные графы (СТГ) отображают особенности физико-химических явлений и процессов, протекающих в элементах ХТС. Наиболее широко при математическом моделировании и анализе ХТС используют две группы СТГ: гидравлические структурные графы (ГСТГ) и тепловые структурные графы (ТСТГ). Гидравлические СТГ применяют для автоматизированного составления систем уравнений гидравлических процессов функционирования сложных ХТС и для определения матриц преобразования гидравлических процессов (см. разделы 3.4 и 3.5). Тепловые СТГ используют для автоматизированного составления систем уравнений тепловых процессов функционирования сложных ХТС и для определения матриц преобразования тепловых процессов (см. разделы 3.6 и 3.7).

Особенности различных классов графов изучают, используя аппарат теории графов. Теория графов – это область дискретной математики, исследующая произвольные дискретные структуры или объекты, разновидностью которых являются графы. Теория графов тесно связана со многими областями математики – теорией множеств, математической логикой, комбинаторикой, топологией, теорией вероятностей и др. При изложении теории графов используют абстрактную теоретико-множественную или наглядно-графическую интерпретацию, которая особенно целесообразна при рассмотрении применений теории графов в различных областях науки: химии, химической технологии, физике, биологии, информатике, кибернетике, электротехнике, электронике, лингвистике, экономике, а также в теории автоматического управления, теории надежности, математическом программировании, теории алгоритмов и др.

## 4.2. ОСНОВЫ ТЕОРИИ ГРАФОВ

Исходя из теоретико-множественных представлений, граф  $G(X, \Gamma)$  задан, если задано непустое множество  $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$  и многозначное отображение  $\Gamma$  множества  $X$  во множество  $X$  (рис. 4.1, а). Многозначное отображение  $\Gamma$  – это закон, по которому каждому элементу  $x_i \in X$  ставится в соответствие некоторое подмножество  $\Gamma_{x_i} \subset X$ . Элементы множества  $X$  изображаются точками и называются *вершинами графа* ( $V$ ), а отображение  $\Gamma$  – отрезками (иногда направленными), соединяющими элемент  $x$  с элементами подмножества  $\Gamma_x$  и называются *ребрами*  $U$  или *дугами*  $\bar{U}$  графа.

*Нуль-граф* – это граф, состоящий из изолированных вершин, не соединенных ребрами (дугами) (рис. 4.1, б). Граф  $G = (X, \Gamma)$  называется *конечным*, если число его вершин  $|X|$  конечно. Граф  $G$  называется  *$\Gamma$ -конечным*, если для каждой вершины  $x \in X$  множество  $\Gamma_x$  конечно. Некоторый конечный граф, изображенный на рис. 4.1, а, определяется множеством:  $X = \{x_0, x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}$ . Отображение  $\Gamma$  характеризуется следующими соотношениями:

$$\begin{aligned}\Gamma x_0 &= \{x_1, x_2, x_3, x_4, x_5\}; & \Gamma x_1 &= \{x_0, x_2\}; & \Gamma x_2 &= \{x_0, x_1, x_3\}; & \Gamma x_4 &= \{x_0, x_3\}; \\ \Gamma x_5 &= \{x_0\}.\end{aligned}$$

В зависимости от особенностей многозначного отображения  $\Gamma$  выделяют следующие виды графов: неориентированные, ориентированные и смешанные графы, симметрические и асимметрические графы (рис. 4.2). Неориентированный граф содержит только ребра; ориентированный граф, или орграф, содержит только дуги; смешанный граф содержит ребра и дуги.

Направленный граф называется *симметрическим*, если для любых двух вершин  $x_i$  и  $x_j$  из того, что  $x_i \in \Gamma x_j$ , следует, что  $x_j \in \Gamma x_i$ . Если эти условия удовлетворяются не для всех пар вершин графа, то граф называется *асимметрическим*. Две вершины графа называются *смежными*, если они определяют ребро или дугу графа. Каждой неизолированной вершине графа при-

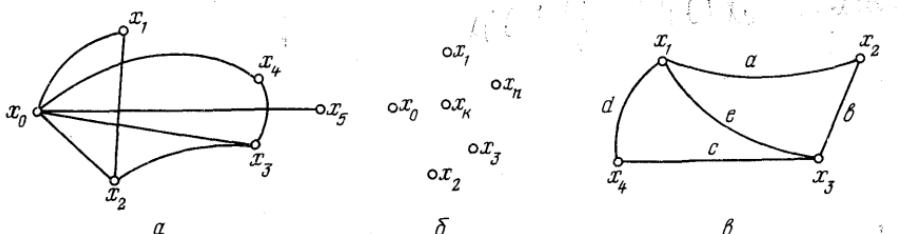


Рис. 4.1. Различные графы:

$a$ -граф, определяемый множеством вершин  $X = \{x_0, x_1, \dots, x_5\}$ ;  $b$  – нуль-граф;  $c$  – граф, определяемый множеством вершин  $X = \{x_1, x_2, x_3, x_4\}$ .

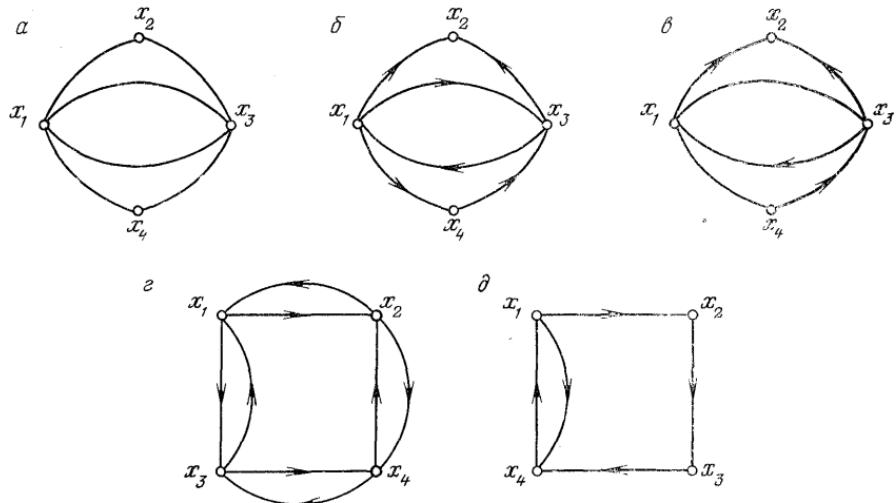


Рис. 4.2. Различные виды графов:

*α* – ненаправленный, или неориентированный; *β* – направленный, или орграф; *γ* – смешанный; *δ* – симметрический; *ε* – асимметрический граф

надлежит одно или несколько ребер (дуг), которые называют инцидентными данной вершине. Так, вершине  $x_1$  графа, изображенного на рис. 4.1, *в*, инцидентны ребра *a*, *d*, *e*; вершине  $x_3$  – ребра *b*, *c*, *e*.

Две различные дуги (два различных ребра) смежны, если они имеют общую вершину.

В направленных графах (орграфах) выделяют следующие типовые конфигурации (фрагменты), образованные совокупностью их дуг: путь, контур и петля (рис. 4.3, *а*). Путь – это

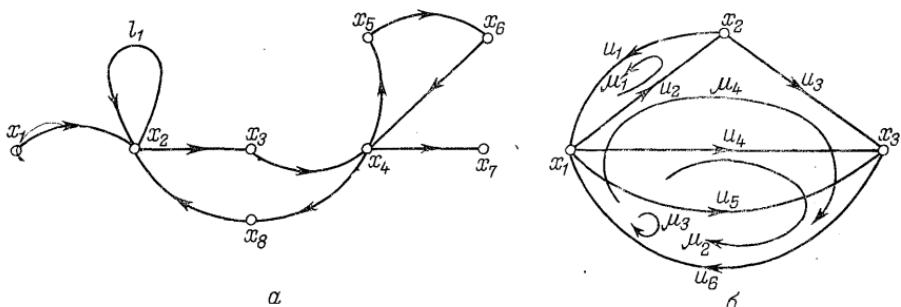


Рис. 4.3. Типовые конфигурации (фрагменты) направленных графов:

*α* – путь  $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7)$ ; элементарный путь  $(x_1, x_2, x_3, x_4, x_7)$ , дважды вершина не встречается: контур  $(x_2, x_3, x_4, x_5, x_6, x_7, x_2)$ ; элементарный контур  $(x_5, x_6, x_4, x_5)$ ; петля  $l_1$ ; *б* – элементарные контуры  $\mu_1 = (x_1, x_2, x_1) = (u_1, u_2)$ ;  $\mu_2 = (x_1, x_3, x_1) = (u_4, u_6)$ ;  $\mu_3 = (x_3, x_1, x_3) = (u_5, u_6)$ ;  $\mu_4 = (x_1, x_2, x_3, x_4) = (u_2, u_3, u_6)$ ; параллельные пути  $(u_2, u_3, u_4)$ ,  $(u_4, u_5)$ ; циклы  $\mu_5 = (x_1, x_2, x_3, x_1) = (u_2, u_3, u_4)$ ;  $\mu_6 = (x_1, x_3, x_1) = (u_4, u_5)$ ; цепи  $(u_1, u_3)$ ,  $(u_2, u_3)$ ,  $(u_6, u_3)$ ,  $(u_2, u_4)$

последовательность дуг между любой парой вершин графа, в которой конец одной дуги является началом другой дуги. Элементарный путь – это такой путь, в котором никакая вершина дважды не встречается. Контур – это такой замкнутый путь, в котором его начальная и конечная вершины совпадают. Элементарный контур – это такой контур, в котором все его вершины различны (за исключением начальной и конечной вершин, которые совпадают). Длиной пути (или контура) называется число дуг, которые его образуют. Петля – это элементарный контур единичной длины. Сетевой граф – это орграф, содержащий множество параллельных элементарных путей, но не содержащий петель и контуров (рис. 4.4, а, б).

В неориентированном графе выделяют следующие типовые конфигурации (фрагменты), образованные совокупностью ребер: цепь и цикл (рис. 4.4, в). Цепь – это непрерывная последовательность ребер между любой парой вершин неориентированного графа. Для каждого цикла произвольно выбирают его ориентацию, которая устанавливает направление последовательного обхода его ребер от начальной к конечной вершине цикла. Простая цепь – это такая цепь, все ребра которой различны. Составная цепь – это цепь, содержащая повторяющиеся ребра. Цепь орграфа – непрерывная неупорядоченная последовательность дуг между любой парой вершин орграфа.

Цикл – это замкнутая цепь ненаправленного графа, в которой его начальная и конечная вершины совпадают. Цикл в ненаправленном графе может быть простым, составным или элементарным.

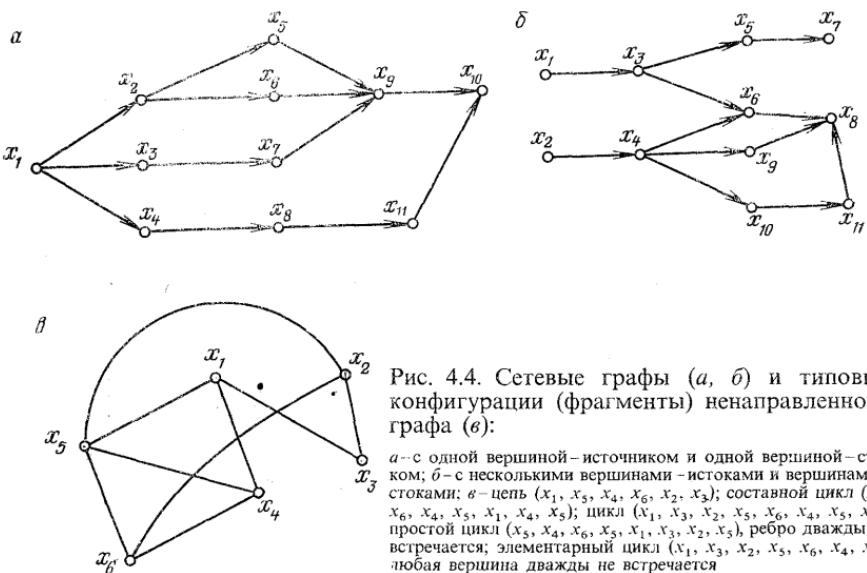


Рис. 4.4. Сетевые графы (а, б) и типовые конфигурации (фрагменты) ненаправленного графа (в):

а – с одной вершиной – источником и одной вершиной – стоком; б – с несколькими вершинами – источниками и вершинами – стоками; в – цепь ( $x_1, x_5, x_4, x_6, x_2, x_3$ ); цикл ( $x_5, x_6, x_4, x_5, x_1, x_4, x_5$ ); простой цикл ( $x_5, x_4, x_6, x_5, x_1, x_3, x_2, x_5$ ), ребро дважды не встречается; элементарный цикл ( $x_1, x_3, x_2, x_5, x_6, x_4, x_1$ ), любая вершина дважды не встречается

тарным. Простой цикл – это цикл, содержащий отличные одно от другого ребра. Составной цикл – это цикл, который содержит повторяющиеся ребра. Элементарный цикл – простой цикл, в котором каждая вершина встречается только один раз (за исключением начальной и конечной вершин, которые совпадают).

В орграфе также рассматривают типовые конфигурации в виде цепей и циклов. Цикл орграфа – это либо элементарный контур, либо совокупность двух параллельных элементарных путей между любой парой вершин графа (рис. 4.3, б).

Введем понятие независимых циклов графа. Пусть граф  $G(X, T)$  имеет  $m$  ребер. Каждому циклу  $\mu_i$  графа сопоставим  $m$ -мерный вектор-цикл:  $\bar{\mu}_i = (\mu_i^1, \mu_i^2, \dots, \mu_i^m)$ , придав каждому  $i$ -му циклу графа  $\mu_i$  произвольное направление. Если цикл  $\mu_i$  проходит через ребро  $u_k$  в направлении его ориентации  $r_k$  раз, а в противоположном направлении  $s_k$  раз, то координата  $\bar{\mu}_i^k = r_k - s_k$ . Вектор  $\bar{\mu}_i$  пространства  $R_n$  будем называть вектором-циклом, соответствующим  $i$ -му циклу  $\mu_i$ . Независимые циклы – это такие циклы графа, для которых соответствующие им векторы-циклы линейно независимы.

Взвешенный граф – это такой граф, ребрам (дугам) и (или) вершинам которого приписаны определенные веса в виде числовых значений или коэффициентов.

Связный граф – это граф, для каждой пары вершин которого существует соединяющая их цепь (рис. 4.5, а). Несвязный граф состоит из нескольких отдельных связных графов (его компонентов) (рис. 4.5, б). Дерево – это связный граф, в котором любая пара его вершин соединена только одной цепью (рис. 4.5, в, г). Полный граф – это такой граф, в котором любая пара его вершин соединена ребром (рис. 4.5, е).

Плоский (планарный) граф – это такой граф, для которого можно осуществить его правильную укладку на плоскости так, чтобы разным вершинам графа соответствовали различные точки плоскости, а ребрам (дугам) соответствовали простые линии, не имеющие никаких общих точек, кроме их концевых точек.

Двудольный граф – это граф  $G = (X, Y, \Gamma)$ , множество вершин которого  $V = X \cup Y$  состоит из двух непересекающихся подмножеств  $X \cap Y = \emptyset$ , а каждое ребро (дуга) инцидентно вершинам из этих подмножеств, т. е. ребрам (дугам) соответствует многозначное отображение  $\Gamma X \subset Y$  и  $\Gamma Y \subset X$  (рис. 4.6, а). Двудольный граф также называют простым или двусторонним графом.

Мультиграф – это граф  $G(V, U)$ , в котором некоторые пары вершин могут быть соединены более чем одним ребром (или кратными дугами) (рис. 4.6, б).

Степень вершины графа – это число  $\rho(i)$ , равное числу ребер (дуг), инцидентных этой  $i$ -й вершине.

Так, степени вершин графа, изображенного на рис. 4.6, б, соответственно равны:  $\rho(x_1) = \rho(x_4) = 3$ ;  $\rho(x_2) = 5$ ;  $\rho(x_3) = 4$ ;  $\rho(x_5) = 1$ .

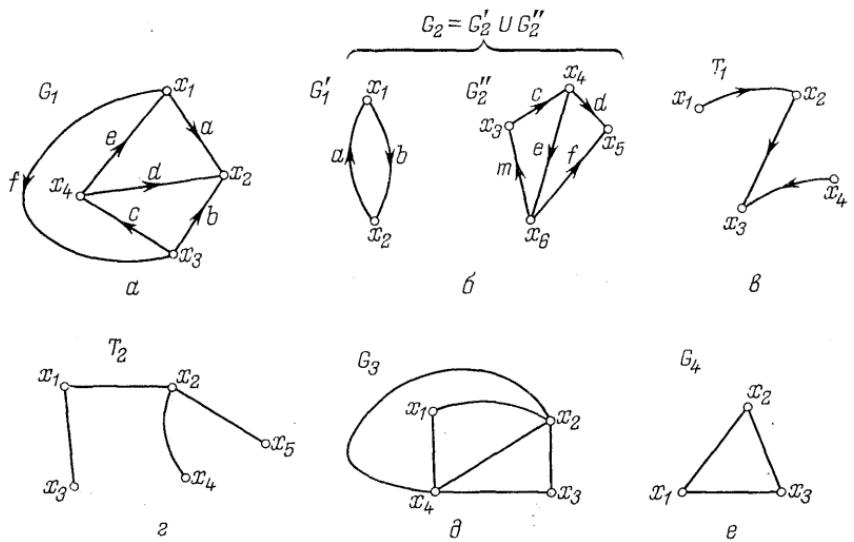


Рис. 4.5. Связный (а) и несвязный (б) графы, деревья  $T_1$ ,  $T_2$  (в, г), полные графы (д, е)

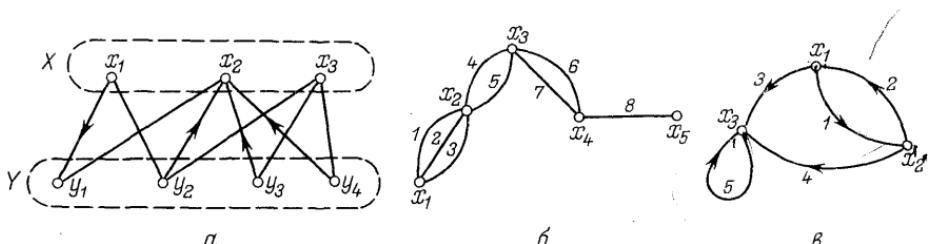
Для каждой вершины орграфа выделяют входную степень вершины  $\rho'(i)$ , равную числу входных дуг, инцидентных этой  $i$ -й вершине, и выходную степень вершины  $\rho''(i)$ , которая равна числу выходных дуг, инцидентных этой  $i$ -й вершине орграфа.

Для орграфа, изображенного на рис. 4.6, в, степени его вершин равны соответственно:  $\rho'(x_1) = \rho'(x_2) = 1$ ;

$$\rho'(x_3) = 3; \quad \rho''(x_1) = \rho''(x_2) = 2; \quad \rho''(x_3) = 1; \\ \rho(x_1) = \rho(x_2) = \rho(x_3) = 3.$$

Очевидно, что в любом орграфе:  $\sum \rho'(i) = \sum \rho''(i)$ ;  $\sum \rho(i) = \sum \rho'(i) + \sum \rho''(i)$ .

Общее число ребер (дуг)  $e = |E|$  некоторого графа  $G(V, E)$ ,



имеющего  $v = |V|$  вершин, определяется следующим соотношением:  $e = 1/2 \sum_i^v \rho(i)$ .

1

Среди вершин орграфа можно выделить три множества вершин: вершины-источники, для каждой из которых  $\rho'(i) = 0$  и  $\rho''(i) \neq 0$ ; вершины-стоки, для каждой из которых  $\rho''(j) = 0$  и  $\rho'(j) \neq 0$ ; смешанные вершины, для каждой из которых  $\rho'(k) \neq 0$  и  $\rho''(k) \neq 0$ . Висячая вершина графа – это вершина, которой инцидентно одно ребро (дуга), т. е.  $\rho(i) = 1$ .

Граф является топологической, а не геометрической фигуруй. Топологическая фигура – это такая фигура, определенные свойства которой инвариантны при ее взаимонепрерывном и взаимооднозначном пространственном преобразовании. Существенные свойства связного графа, которые инвариантны при его взаимонепрерывном и взаимооднозначном пространственном преобразовании, определяются только числом его вершин, числом его дуг (ребер) и характером связей между вершинами.

Так как граф является топологической фигурой, один и тот же граф может быть геометрически изображен различными способами: вершины могут быть расположены в произвольном порядке, соединяющие их ребра (дуги) могут быть проведены в виде кривых, прямых или ломаных линий. Два графа называются изоморфными, если они имеют одинаковое число вершин и одинаковое число ребер, если каждой паре вершин, соединенных ребром, в одном графе соответствует такая же пара вершин, соединенных ребром в другом графе. Примеры изоморфных неориентированных графов ( $G_1$  и  $G_2$ ) и изоморфных орграфов ( $G_3$  и  $G_4$ ) изображены на рис. 4.7. Обязательным условием изоморфности орграфов является одинаковая ориентация всех их дуг.

Подграф  $G'(V', E')$  графа  $G(V, E)$  – это такой граф, множество вершин  $V'$  которого является подмножеством  $V$  ( $V' \subset V$ ), а множество ребер (дуг)  $E' \subset E$ , каждое из которых принадлежит только вершинам из  $V'$  (рис. 4.8).

Остевой подграф  $G'(V, E')$  – это такой подграф, который содержит все вершины графа  $G(V, E)$  и некоторое подмножество его

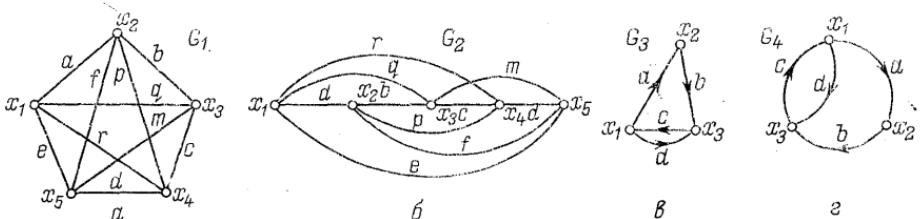


Рис. 4.7. Изоморфные неориентированные графы –  $G_1$ ,  $G_2$  (а, б) и изоморфные орграфы –  $G_3$ ,  $G_4$  (в, г)

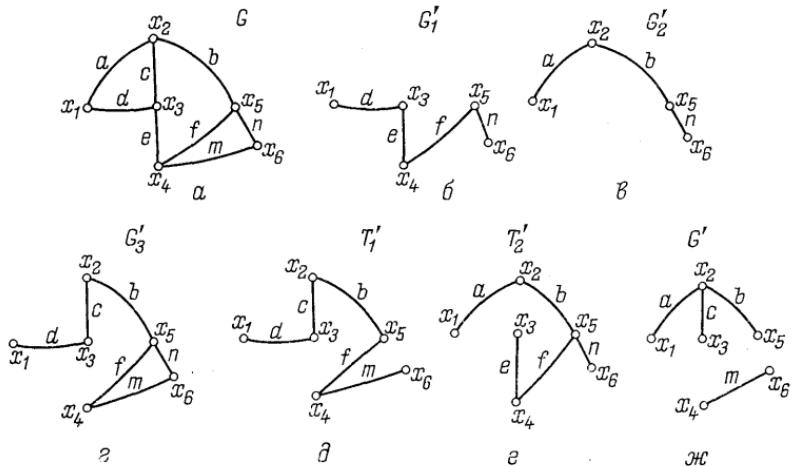


Рис. 4.8. Исходный граф  $G$  (а), подграфы  $G'_1$ ,  $G'_2$  (б, в), оставной подграф  $G'_3$  (г), оставные деревья  $T'_1$ ,  $T'_2$  (д, е), дополнение подграфа  $G'_1$  (ж)

ребер (дуг)  $E' \subset E$ . Остовное дерево некоторого графа – это его оставной подграф, являющийся деревом.

На рис. 4.8 изображены для некоторого исходного графа  $G$  (рис. 4.8, а) два произвольных подграфа  $G'_1 \subset G$  и  $G'_2 \subset G$  (рис. 4.8, б, в), оставной подграф, или остав,  $G'_3 \subset G$  (рис. 4.8, г) и два оставных дерева  $T'_1 \subset G$  и  $T'_2 \subset G$  (рис. 4.8, д, е).

В дальнейшем каждое оставное дерево данного графа будем также называть деревом графа. Дополнение подграфа – это подграф  $G'_{\text{д}}$ , состоящий из вершин и ребер (дуг), которыми исходный граф  $G$  отличается от его подграфа  $G'$ . Очевидно, что для любого графа  $G$  его подграф  $G'$  и дополнение этого подграфа  $G'_{\text{д}}$ , взятые вместе, образуют исходный граф  $G$ , т. е.  $G = G' \cup G'_{\text{д}}$ . Для подграфа  $G'_1$  (рис. 4.8, б) его дополнение  $G'_{1\text{д}}$  изображено на рис. 4.8, ж.

Ребра (дуги), входящие в оставное дерево некоторого графа, называют ветвями дерева графа. Ребра (дуги), входящие в дополнение оставного дерева графа, называют хордами графа.

На рис. 4.9, а изображен некоторый орграф  $G$ , а на рис. 4.9, б, в показаны сплошными линиями два возможных дерева этого графа  $T_1$  и  $T_2$ ; хорды графа, или дополнения деревьев  $T_1$  и  $T_2$ , изображены штриховыми линиями.

Дерево, все ветви которого инцидентны одной вершине, называют иногда лангренжевым деревом графа (рис. 4.9, б).

Несвязный граф имеет число деревьев, которое равно числу его связных компонентов. Совокупность деревьев несвязного графа называют лесом  $F$  графа.

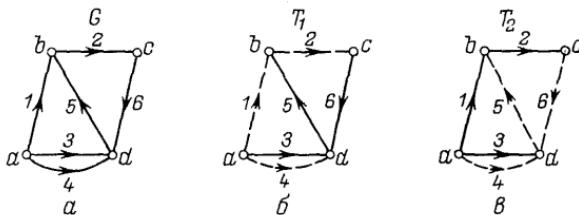


Рис. 4.9. Исходный граф (*a*) и два возможных дерева (*б* и *в*)

На рис. 4.10, *б* лес несвязного графа, представленного на рис. 4.10, *а*, изображен сплошными линиями, а хорды — штриховыми.

Для решения разнообразных задач анализа свойств графов используют различные *числовые характеристики графов*, представляющие собой функции, заданные на множестве графов и принимающие определенные числовые значения. Наиболее употребительные числовые характеристики графов — *число вершин* —  $v$ , *число ребер* (дуг) —  $e$ ; *ранг графа*  $R(G)$ ; *цикломатическое число*  $v(G)$ ; *число вершинной связности*  $\kappa(G)$ ; *число реберной связности*  $\lambda(G)$  и др. *Ранг графа*  $R(G)$  равен величине:

$$R(G) = v - k, \quad (4.1)$$

где  $v$  — число вершин графа;  $k$  — число связных компонентов несвязного графа.

Следовательно, ранг связного графа на единицу меньше числа его вершин.

Цикломатическое число  $v(G)$  равно наименьшему числу ребер (дуг), удаление которых из графа приводит к образованию оставшегося дерева.

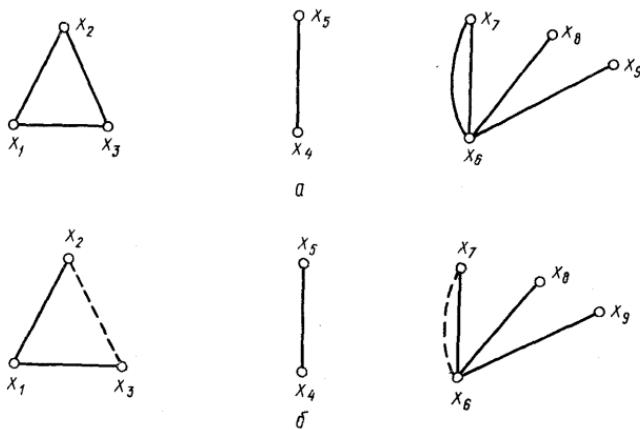


Рис. 4.10. Несвязный граф (*а*) и лес несвязного графа (*б*)

*Число вершинной связности*  $\kappa(G)$  равно наименьшему числу вершин графа, удаление которых из этого графа приводит к образованию несвязного графа или тривиального графа, состоящего из одной вершины.

*Число реберной связности*  $\lambda(G)$  равно наименьшему числу ребер графа, удаление которых из этого графа приводит к образованию несвязного графа или тривиального графа.

Дерево (лес) и его дополнение играют важную роль в практических приложениях теории графов к исследованию ХТС. Рассмотрим теоремы IV-1 и IV-2, определяющие связь между числом вершин, ветвей дерева и хорд графа.

**Теорема IV-1.** *Любой связный граф имеет дерево.* Если рассматриваемый граф не является деревом, то он содержит, по меньшей мере, один цикл. При удалении ребра (дуги) из этого цикла оставшийся подграф либо становится деревом, либо содержит какой-нибудь другой цикл. Процесс удаления ребер можно продолжать до тех пор, пока оставшийся подграф не окажется деревом. Так, для превращения орграфа  $G$  (рис. 4.9, а) в дерево  $T_2$  (рис. 4.9, б) последовательно удалялись дуги 4, 5, 6.

**Теорема IV-2.** *Если дерево имеет  $v_T$  вершин, то число его ветвей  $e_T$  определяется соотношением*

$$e_T = v_T - 1 = R_T, \quad (4.2)$$

где  $R_T$  – ранг дерева.

Теорема, очевидно, справедлива, если дерево состоит из одной ветви и имеет две вершины. Добавление еще одной смежной ветви увеличит  $v_T$  и  $e_T$  на единицу, т.е. не нарушит соотношения (4.2). Это соотношение не нарушится, пока конфигурация с добавленными ветвями остается деревом. Например, любое дерево  $T$  орграфа  $G$  (рис. 4.9, а) содержит  $v_T = 4 - 1 = 3$  ветви.

Из теоремы IV-2 вытекает ряд следствий.

**Следствие 1.** Для связного графа, содержащего циклы, число вершин  $v$  и число ребер  $e$  находится в соотношении  $e > (v - 1) = R$ , где  $R$  – ранг графа. Действительно, добавление к дереву ребра, образующего цикл, увеличивает число ребер  $e$  на единицу, но не изменяет величину  $v$ .

**Следствие 2.** Если лес состоит из  $k$  компонентов и имеет  $v_F$  вершин, то число ветвей леса определяется соотношением:

$$e_F = v_F - k = R. \quad (4.3)$$

Действительно, для каждой связной компоненты справедливо выражение (4.2). Суммирование таких выражений для  $k$  компонентов леса с учетом очевидных соотношений  $e_F = \sum e_T$  и  $v_F = \sum v_T$  приводит к выражению (4.3). Для несвязного графа, изображенного на рис. 4.10, а, число ветвей леса  $e_{SF} = 9 - 3 = 6$  (показаны сплошными линиями на рис. 4.10, б).

**Следствие 3.** Число хорд, входящих в дополнение дерева, равно:

$$e_{ST} = e - e_T = e - v_T + 1 = e - R, \quad (4.4)$$

где  $R$  – ранг графа.

Для графа, изображенного на рис. 4.9, а, число хорд  $e_{ST} = 6 - 4 + 1 = 3$  (штриховые линии на рис. 4.9, б, в).

**Следствие 4.** Число хорд, входящих в дополнение леса, равно:

$$e_{SF} = e - e_F = e - v_F + k = e - R. \quad (4.5)$$

Для несвязного графа, изображенного на рис. 4.10, а, число хорд  $e_{SF} = 8 - 9 + 3 = 2$  (штриховые линии на рис. 4.10, б).

Из следствий теоремы IV-2 вытекает, что цикломатическое число связного графа  $v(G)$ , или дефицит графа  $v(G) = e_{ST}$  и определяет число отличающихся один от другого циклов графа. Действительно, добавление к дереву одной хорды образует один цикл, причем все образованные таким образом циклы будут различными, так как в каждый из них будет входить, по крайней мере, по одному ребру, присущему лишь данному циклу. Очевидно, дефицит дерева (леса) равен нулю.

Отделяющее множество дуг (ребер) связного графа  $G(V, E)$  – это такое множество дуг (ребер), после удаления которых связный граф становится несвязным.

Другими словами, отделяющее множество делит связный граф на два изолированных подграфа. Так как ранг исходного связного графа  $R(G) = (v - 1)$ , удаление дуг (ребер), принадлежащих отделяющему множеству, дает несвязный граф (возможно с одной изолированной вершиной), ранг которого равен  $(v - 2)$ .

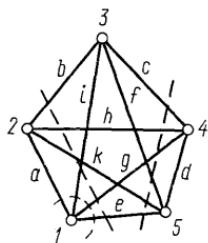


Рис. 4.11. Примеры отделяющих множеств связного графа

Линия отсечения – это линия, пересекающая все ребра (дуги) каждого отсекающего множества и разделяющая множество вершин исходного связного графа на два подмножества, принадлежащие двум несвязным подграфам.

Например, рассмотрим отделяющие множества неориентированного связного графа, изображенного на рис. 4.11. Множества дуг графа  $(a, i, g, e)$ ,  $(b, h, k, i, g, e)$  и  $(c, h, g, f, e)$  являются отделяющими множествами. Каждая штриховая линия отсечения показывает, как отделяющие множества делят связный граф на несвязные подграфы. Отделяющее множество  $(a, i, g, e)$  образовано совокупностью дуг, инцидентных вершине 1, удаление которых из графа изолирует эту вершину 1.

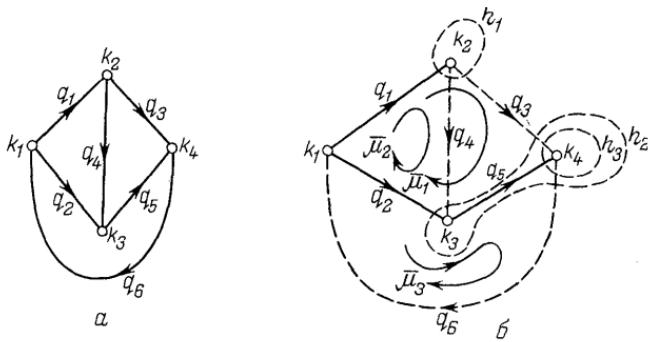


Рис. 4.12. Исходный связный орграф (*a*), его отсечения и фундаментальные циклы (*b*)

Отсечение связного графа  $\eta_i$  – это такое отделяющее множество дуг, в которое входит только одна ветвь оствового дерева. Число отсечений связного графа равно рангу графа  $R(G) = e_T$ . Выбранное формальное дерево связного графа однозначно определяет дуги, входящие в каждое отсечение  $\eta_i$ . В связном орграфе каждому  $i$ -ому отсечению можно поставить в соответствие вектор, ориентированными координатами которого являются дуги – ветви дерева и хорды графа.

Ориентация координат каждого вектора отсечения определяется следующим образом: проводят линию отсечения; ориентация пересекаемой ветви формального дерева считается положительной; ориентация пересекаемых хорд орграфа положительна (отрицательна), если она совпадает (не совпадает) с ориентацией ветви.

Например, для связного орграфа, изображенного на рис. 4.12, *a* при формальном дереве  $T = \{q_1, q_2, q_5\}$  имеем следующие отсечения (штриховые линии) на ри. 4.12, *b*:

$\eta_1 = \{q_1, -q_3, -q_4\}$ ;  $\eta_2 = \{q_2, q_3, q_4, -q_6\}$ ;  $\eta_3 = \{q_5, q_3, -q_6\}$ , а также фундаментальные циклы:  $\bar{\mu}_1 = \{q_3, q_1, -q_2, -q_5\}$ ;  $\bar{\mu}_2 = \{q_4, q_1, -q_2\}$ ;  $\bar{\mu}_3 = \{q_6, q_2, q_5\}$ .

### 4.3. МАТРИЧНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ГРАФОВ

Любой граф можно представить, или отобразить при помощи различных матриц: матрицы ветвей [ $L$ ], матрицы смежности [ $H$ ], матрицы инциденций [ $S$ ], матрицы циклов [ $M$ ], матрицы фундаментальных циклов (циклической матрицы) [ $C$ ] и матрицы отсечений [ $N$ ].

Каждая из указанных матриц характеризует определенные свойства графа. Матричное представление графов позволяет отобразить структурные особенности графов. Матрицы можно использовать при составлении различных систем уравнений.

Приведем определения указанных матриц для некоторого орграфа  $G(V, E)$ , состоящего из  $v = |V|$  вершин и  $e = |E|$  дуг.

Матрица ветвей  $[L]$  некоторого орграфа  $G(V, E)$  – это матрица порядка  $(2 \times e)$  с элементами:

$$l_{ij} = \begin{cases} l_{1j} & \text{номеру } n\text{-й вершины, из которой } j\text{-я дуга выходит;} \\ l_{2j} & \text{номеру } m\text{-й вершины, в которую } j\text{-я дуга входит.} \end{cases} \quad (4.6)$$

Например, матрица ветвей  $[L]$  орграфа, изображенного на рис. 4.5, а, имеет вид:

$$[L] = \begin{matrix} & \begin{matrix} a & b & c & d & e & f \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} x_1 & x_3 & x_3 & x_4 & x_4 & x_1 \\ x_2 & x_2 & x_4 & x_2 & x_1 & x_2 \end{matrix} \right] \end{matrix}.$$

Матрица смежности  $[H]$  некоторого орграфа  $G(V, E)$  – это матрица порядка  $(v \times v)$ , строки и столбцы которой соответствуют вершинам графа, с элементами

$$h_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{если } i\text{-я вершина не связана дугой с } j\text{-й вершиной;} \\ 1, & \text{если } i\text{-я вершина связана дугой с } j\text{-й вершиной.} \end{cases} \quad (4.7)$$

Если элемент  $h_{ii} = 1$ , то при  $i$ -й вершине имеется петля, если между  $i$ -й и  $j$ -й вершинами орграфа имеется  $n$  односторонних (кратных) дуг, то элемент  $h_{ij} = n$ . В матрице смежности ненаправленного графа  $[H]$  элемент  $h_{ij}$  равен числу ребер, инцидентных одновременно  $i$ -й и  $j$ -й вершинам графа.

Например, матрица смежности  $[H]$  орграфа, изображенного на рис. 4.6, б, имеет вид:

$$[H] = \begin{matrix} & \begin{matrix} x_1 & x_2 & x_3 \end{matrix} \\ \begin{matrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix} \right] \end{matrix}.$$

Матрица  $[H]$  неориентированного графа, представленного на рис. 4.6, б, имеет вид:

$$[H] = \begin{matrix} & \begin{matrix} x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 \end{matrix} \\ \begin{matrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{matrix} \right] \end{matrix}.$$

Матрица инциденций  $[S]$  орграфа  $G(V, E)$  – это матрица порядка  $(v \times e)$ , строки которой соответствуют вершинам, а столбцы – ребрам графа, с элементами:

$$s_{ij} = \begin{cases} -1, & \text{если } j\text{-я дуга выходит из } i\text{-й вершины;} \\ +1, & \text{если } j\text{-я дуга входит в } i\text{-ю вершину;} \\ 0, & \text{если } j\text{-я дуга не инцидентна } i\text{-й вершине.} \end{cases} \quad (4.8)$$

В  $j$ -ом столбце, соответствующем  $j$ -й петле графа при  $i$ -й вершине, содержится только один элемент, равный 1. Однако в дальнейшем при выполнении различных операций над матрицами инциденции петли графов в матрице  $[S]$  не отображаются.

В матрице инциденций  $[S]$  неориентированного графа элемент  $s_{ij}$  принимает значение 1 или 0 в зависимости от того, инцидентно  $j$ -е ребро  $i$ -й вершине графа или нет. Матрицы инциденций неориентированных графов перемножаются и складываются по обычным правилам матричного исчисления, однако результат этих действий записывается по модулю 2. Для выполнения операций над матрицами инциденций орграфа приведение по модулю 2 не осуществляют, а выполняют операции целочисленными элементами.

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

В качестве примера составим матрицы инциденций для графов, изображенных на рис. 4.5, а и б. Для ориентированного графа (см. рис. 4.5, а):

$$[S_1] = \begin{matrix} & \begin{matrix} a & b & c & d & e & f \end{matrix} \\ \begin{matrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{matrix} & \left[ \begin{array}{rrrrrr} -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 \end{array} \right] \end{matrix};$$

для несвязного графа (см. рис. 4.5, б):

$$[S_2] = \begin{matrix} & \begin{matrix} a & b & c & d & e & f & m \end{matrix} \\ \begin{matrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{matrix} & \left[ \begin{array}{rrrrrrr} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 & -1 \end{array} \right] \end{matrix}.$$

Очевидно, что

$$[S_2] = \left[ \begin{array}{c|c} S'_2 & 0 \\ \hline 0 & S''_2 \end{array} \right]$$

где  $S'_2$ ,  $S''_2$  – подматрицы инциденций, соответствующие связным компонентам несвязного графа  $G_2$  (см. рис. 4.5, б).

Свойства матриц инциденций отражают структурные особенности соответствующих графов, которые могут быть сформулированы в виде теорем IV-3–IV-5.

**Теорема IV-3.** Любой определитель, содержащийся в матрице инциденций орграфа  $[S]$ , равен или 0, или +1, или -1.

**Теорема IV-4.** Определитель любой подматрицы матрицы инциденций орграфа, соответствующей циклу графа, равен нулю.

**Теорема IV-5.** Определитель  $(v - 1)$ -го порядка матрицы инциденций ( $v$  – число строк этой матрицы) связного графа, отличный от нуля, соответствует дереву исходного связного графа.

**Обратная теорема.** Определитель матрицы инциденций, соответствующий дереву графа, отличен от нуля.

Теорема IV-5 может быть распространена и на несвязные графы. В этом случае определитель матрицы инциденций, соответствующий лесу графа, будет иметь порядок  $(v - k)$  и будет отличен от нуля, и обратно – определитель матрицы инциденций порядка  $(v - k)$ , отличный от нуля, соответствует лесу несвязного графа. Таким образом, ранг матрицы инциденций –  $r_S$  равен рангу графа, т. е. числу ветвей дерева (леса) графа:

Применение приведенных теорем можно проиллюстрировать на примере графов, изображенных на рис. 4.5, а и б. Так, легко убедиться, что для матрицы инциденций  $[S_1]$  определитель третьего порядка, записанный для дуг  $a$ ,  $b$  и  $f$  орграфа (см. рис. 4.5, а), равен нулю:

$$\Delta_1 = \begin{matrix} & a & b & f \\ \begin{matrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} -1 & 0 & -1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{matrix} \right] \end{matrix},$$

а соответствующая  $\Delta_1$  конфигурация в орграфе (см. рис. 4.5, а) является элементарным циклом. Любой определитель третьего порядка матрицы инциденций, который соответствует дереву орграфа (см. рис. 4.5, а), отличен от нуля:

$$\Delta_2 = \begin{matrix} & a & b & c \\ \begin{matrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} -1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \end{matrix} \right] \end{matrix} = 1; \quad \Delta_3 = \begin{matrix} & a & b & c \\ \begin{matrix} x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \end{matrix} \right] = -1. \end{matrix}$$

*Матрица циклов*  $[M]$  орграфа  $G(V, E)$  – это матрица порядка  $(e \times \mu)$ , строки которой соответствуют дугам, а столбцы – эле-

ментарным циклам графа, с элементами:

$$m_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{если } i\text{-я дуга не входит в цикл } \mu_j; \\ 1, & \text{если } i\text{-я дуга входит в } j\text{-й цикл и ее} \\ & \text{ориентация совпадает с ориентацией цикла;} \\ -1, & \text{если } i\text{-я дуга входит в } j\text{-й цикл и ее ориентация} \\ & \text{противоположна ориентации цикла.} \end{cases} \quad (4.9)$$

Таким образом, для составления матрицы  $[M]$  в орграфе необходимо выделить все возможные элементарные циклы, придавая им определенную ориентацию.

Так, для орграфа, изображенного на рис. 4.5, а, если принятая ориентация элементарных циклов по часовой стрелке, матрица циклов  $[M]$  имеет вид:

$$[M_1] = \begin{array}{c|cccccccc} & I & II & III & IV & V & VI & VII & VIII \\ \hline a & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ b & 0 & -1 & -1 & -1 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ c & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 & 0 & -1 & -1 \\ d & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ e & 1 & 1 & 0 & 0 & -1 & -1 & 0 & -1 \\ f & 0 & 0 & 0 & -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \end{array}.$$

Для несвязного орграфа (рис. 4.5, б) матрица циклов  $[M_2]$  имеет вид:

$$[M_2] = \begin{array}{c|cccc} & I & II & III & IV \\ \hline a & -1 & 0 & 0 & 0 \\ b & 1 & 0 & 0 & 0 \\ c & 0 & 1 & 0 & 1 \\ \hline d & 0 & 0 & 1 & 1 \\ e & 0 & 1 & -1 & 0 \\ f & 0 & 0 & -1 & -1 \\ \hline m & 0 & 1 & 0 & 1 \end{array}.$$

Очевидно, что

$$[M_2] = \left[ \begin{array}{c|c} M'_2 & 0 \\ \hline 0 & M''_2 \end{array} \right]$$

где  $M'_2$  и  $M''_2$  – подматрицы, соответствующие связным компонентам несвязного графа  $G$  (рис. 4.5, б).

**Теорема IV-6.** Ранг матрицы циклов  $r_M$  равен числу хорд соответствующего графа, т. е. цикломатическому числу графа:

$$r_M = e - v + k = e - R(G) = v(G). \quad (4.10)$$

*Фундаментальный цикл графа* – это элементарный цикл, в который входит одна хорда. Очевидно, что все фундаментальные циклы линейно независимы. Выбранное для анализа дерево графа (*формальное дерево*) однозначно определяет ребра, входящие в каждый фундаментальный цикл. Ориентация фундаментального цикла совпадает с направлением хорды, которая его образует вместе с ветвями дерева графа.

Для формального дерева  $T_1$  орграфа, изображенного на рис. 4.9, б, можно выделить следующие фундаментальные циклы:  $\bar{\mu}_1$  – образован хордой 1 и ветвями 3 и 5, т. е.  $\bar{\mu}_1 = \{1; -3; -5\}$ ;  $\bar{\mu}_2 = \{2; 5; 6\}$ ;  $\bar{\mu}_3 = \{4, -3\}$

*Цикломатическая матрица*  $[C]$ -орграфа  $G(V, E)$  – это матрица циклов порядка  $(e \times v(G))$ , составленная для определенного формального дерева только из векторов-циклов, которые соответствуют фундаментальным циклам орграфа. Ориентация каждого фундаментального цикла совпадает с ориентацией образующей его хорды графа.

При составлении матрицы  $[C]$  ее столбцы располагают в порядке возрастания номеров хорд, образующих фундаментальные циклы, а строки располагают таким образом, чтобы сначала шли строки, соответствующие хордам, а затем – ветвям дерева (в порядке возрастания номеров).

В общем случае цикломатическую матрицу для любого графа  $G(V, E)$  можно записать следующим образом:

$$[C] = \begin{bmatrix} E \\ F \end{bmatrix}, \quad (4.11)$$

где  $[E]$  – единичная матрица, порядок которой равен  $[(e - R) \times (e - R)]$ ;  $[F]$  – матрица порядка  $[R \times (e - R)]$ ;  $e$  – число дуг,  $R$  – ранг графа.

Цикломатические матрицы для орграфа, изображенного на рис. 4.9, а, для формального дерева  $T_1$  (см. рис. 4.9, б) и формального дерева  $T_2$  (см. рис. 4.9, в) имеют следующий вид:

$$[C_1] = 4 \begin{bmatrix} \bar{\mu}_1 & \bar{\mu}_2 & \bar{\mu}_3 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 1 \\ 4 & -1 & 0 & -1 \\ 5 & -1 & 1 & 0 \\ 6 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}; \quad [C_2] = 6 \begin{bmatrix} \bar{\mu}_1 & \bar{\mu}_2 & \bar{\mu}_3 \\ 4 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 1 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 1 \\ 2 & 0 & 0 & 1 \\ 3 & -1 & 1 & -1 \end{bmatrix}.$$

*Матрица отсечений*  $[N]$  связного графа  $G(V, E)$  – это матрица порядка  $(R(G) \times e)$ , строки которой соответствуют отсечениям,

а столбцы – дугам (ребрам) графа, с элементами:

$$\eta_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{если } j\text{-я дуга не входит в } i\text{-е отсечение;} \\ 1, & \text{если } j\text{-я дуга является или ветвью формального} \\ & \text{дерева, или хордой, ориентированной по отно-} \\ & \text{шению к линии отсечения, как и } i\text{-я ветвь дерева;} \\ -1, & \text{если } j\text{-я дуга является хордой, имеющей по отно-} \\ & \text{шению к линии отсечения ориентацию, противопо-} \\ & \text{ложную ориентации } i\text{-й ветви дерева.} \end{cases} \quad (4.12)$$

Строки матрицы  $[N]$  необходимо располагать в порядке возрастания номеров ветвей формального дерева, а столбцы – так, чтобы сначала шли столбцы, соответствующие ветвям дерева, а затем хордам (в порядке возрастания номеров). В общем случае для любого графа матрица отсечений может быть записана в виде:

$$[N] = [E | D], \quad (4.13)$$

где порядок матрицы  $[D]$  равен  $[R \times (e - R)]$ , а порядок единичной матрицы  $[E]$  равен  $(R \times R)$ .

Например, для орграфа, изображенного на рис. 4.12, а при формальном дереве  $T$  (рис. 4.12, б) матрица отсечений  $[N]$  имеет вид:

$$[N] = \begin{matrix} & q_1 & q_2 & q_5 & q_3 & q_4 & q_6 \\ \eta_1 & \left[ \begin{array}{cccccc} +1 & 0 & 0 & | & -1 & -1 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & | & +1 & +1 & -1 \\ 0 & 0 & +1 & | & +1 & 0 & -1 \end{array} \right] \\ \eta_2 \\ \eta_3 \end{matrix}$$

#### 4.4. ПОТОКОВЫЕ ГРАФЫ ХТС

Потоковые графы (ПГ) ХТС – это взвешенные орграфы, отображающие физико-химические преобразования потоков вещества и энергии, которые осуществляются технологическими операторами (элементами) ХТС. Рассмотрим методику построения различных видов ПГ (см. раздел 4.1).

##### 4.4.1. Параметрические потоковые графы

Параметрические потоковые графы (ППГ) – это взвешенные по дугам и по вершинам связные орграфы, отображающие преобразование элементами ХТС параметров физических потоков системы. Вершины ППГ отображают технологические операторы ХТС, а также точкистыковки технологических трубопроводов, источки и стоки физических потоков ХТС. Дуги ППГ соответствуют физическим потокам ХТС. Вес каждой дуги ППГ равен неотрицательному числу  $\pi_i$  – параметричности физического

потока, отображаемого этой дугой. В общем случае все дуги ППГ сложной ХТС равнопараметричны. Вес каждой вершины ППГ соответствует системе уравнений математической модели ТО (1.4), который этой вершиной графа отображается.

#### 4.4.2. Материальные потоковые графы

Материальные потоковые графы (МПГ) – это взвешенные по дугам орграфы, которые отображают преобразование технологическими операторами ХТС либо общих массовых расходов физических потоков системы, либо массовых расходов химических компонентов (химических элементов), физических и фиктивных потоков ХТС. МПГ подразделяют на графы по общему массовому расходу физических потоков (МПГО) и графы по массовому расходу некоторого химического компонента (МПГК) или некоторого химического элемента (МПГЭ).

МПГО – это взвешенный по дугам связный орграф, который отображает преобразование ТО общих массовых расходов физических потоков ХТС. Вершины МПГО соответствуют технологическим операторам системы, которые трансформируют общие массовые расходы физических потоков; точкамстыковки трубопроводов; источникам и стокам вещества физических потоков. Дуги МПГО соответствуют физическим потокам ХТС. Вес каждой дуги МПГО равен общему массовому расходу физического потока, отображаемого этой дугой графа. Для каждой вершины МПГО справедливо уравнение баланса по общим массовым расходам физических потоков (2.50) для ТО, отображаемого этой вершиной графа.

МПГК (МПГЭ) – это взвешенный по дугам связный или несвязный орграф, который отображает преобразование ТО системы массовых расходов одного вида химического компонента (элемента). Вершины МПГК соответствуют технологическим операторам системы, преобразующим массовые расходы одного вида химического компонента; точкамстыковки трубопроводов; внешним и внутренним (фиктивным) источникам и стокам этого химического компонента ХТС.

Дуги МПГК соответствуют физическим и фиктивным потокам, содержащим в своем составе этот компонент. Вес каждой дуги МПГК равен массовому расходу химического компонента в физическом или фиктивном потоке, который этой дугой графа отображается. Для каждой вершины МПГК справедливо уравнение баланса по массовым расходам химического компонента физических и фиктивных потоков (2.51) для ТО, который этой вершиной графа отображается.

#### 4.4.3. Тепловые потоковые графы

Тепловые потоковые графы (ТПГ) – это взвешенные по дугам связные орграфы, отображающие преобразование ТО системы тепловых расходов физических и фиктивных потоков теплоты ХТС. Вершины ТПГ отображают ТО, которые изменяют тепловые расходы физических потоков, точкистыковки трубопроводов, внешние и внутренние (фиктивные) источники и стоки теплоты ХТС. Дуги ТПГ соответствуют физическим и фиктивным потокам теплоты. Вес каждой дуги равен соответствующей энталпии физического или фиктивного потока, отображеного этой дугой. Для каждой вершины ТПГ справедливо уравнение баланса расхода теплоты физических и фиктивных потоков (2.52) для ТО, который этой вершиной графа отображается.

#### 4.4.4. Эксергетические потоковые графы

Эксергетические потоковые графы (ЭСПГ) – это взвешенные по дугам связные орграфы, отображающие преобразование элементами ХТС расходов эксергий физических и фиктивных потоков вещества и энергии, а также потери эксергии в элементах ХТС. Вершины ЭСПГ соответствуют технологическим операторам, осуществляющим преобразование расходов эксергии, а также соответствуют внутренним и внешним источникам и стокам эксергии. Дуги ЭСПГ соответствуют потокам эксергии физических и фиктивных потоков вещества и энергии, а также потерям эксергии в элементах системы. Вес дуг равен расходам эксергии. Для каждой промежуточной вершины ЭСПГ справедливо уравнение баланса эксергии (2.68).

Отметим основные особенности МПГО, ТПГ и ЭСПГ:

1) ориентированность, так как движение потоков вещества и энергии в системе происходит в строго определенном направлении;

2) асимметричность, потому что не все соседние элементы ХТС связаны между собой обратными технологическими потоками;

3) связность, так как все элементы в системе взаимосвязаны единой цепью потоков вещества или энергии.

Характерные особенности МПГК (МПГЭ) в основном совпадают с особенностями МПГО, ТПГ и ЭСПГ (ориентированность и асимметричность). Отличие состоит в том, что эти графы могут быть как связными, так и несвязными. Несвязность МПГК (МПГЭ) обусловлена тем, что образование химическая убыль или целевое выделение данного химического компонента (элемента) происходит только лишь в некоторых элементах ХТС при наличии необходимых технологических условий.

*Методика построения ПГ* состоит из следующих этапов:

- 1) изучение физико-химической сущности технологических процессов ХТС и построение операторной схемы системы;
- 2) составление списков внешних и внутренних (фиктивных) источников и стоков ХТС;
- 3) составление списков покомпонентного состава физических потоков ХТС;
- 4) составление списков физических и фиктивных потоков вещества и теплоты;
- 5) составление таблиц соответствия ТО, внешних и внутренних источников и стоков ХТС вершинам ПГ;
- 6) составление таблиц соответствия физических и фиктивных потоков вещества и теплоты ХТС дугам ПГ;
- 7) графическое изображение ПГ.

✓ Пример 4.1. Для ХТС, операторная схема которой изображена на рис. 4.13, а, построить ППГ, МПГО, МПГК и ТПГ. Каждый  $i$ -й физический поток системы  $L_i$  характеризуется набором параметров:  $m_i$  – общий массовый расход физического потока,  $m_{ij} = m_i x_{ij}$  – массовый расход  $j$ -го химического компонента ( $j = A, B, E$ ) в  $i$ -ом физическом потоке;  $t_i$  – температура;  $H_i$  – энталпия физического потока.

В операторе химического превращения  $II$  (идеального смешения) протекает химическая реакция:  $A + B \xrightarrow{k} E + \Delta H$ , сопровождаемая выделением тепла  $\Delta H$ .

Компонента  $A$  подается на вход ТО химического превращения в избытке по сравнению со стехиометрическим соотношением компонентов  $A:B$ . Степень разделения компонента  $A$  в ТО диффузионного разделения  $III$  равна величине  $\psi = c_{5A}/c_{4A}$ . В ТО охлаждения  $IV$  происходит охлаждение физического потока  $L_5$  за счет потока охлаждающей воды  $L_7$ . Известны объем реактора  $V$  и плотность смеси веществ  $\rho$  в реакторе.

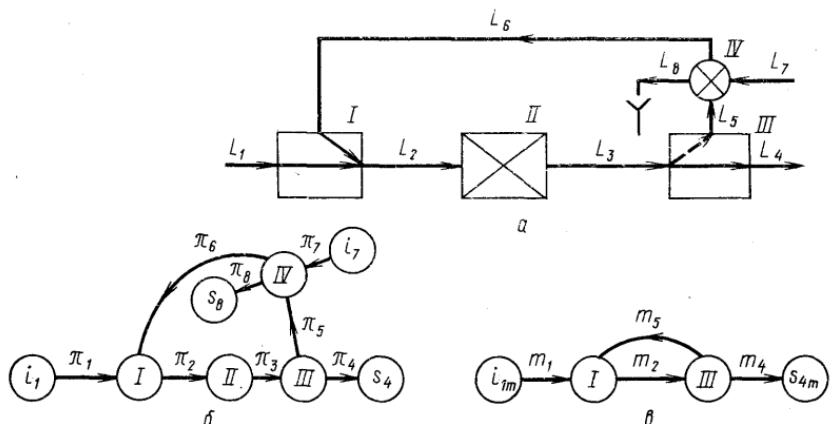


Таблица 4.1. Таблица соответствия элементов XTC (TO), внутренних и внешних источников и стоков XTC вершинам потоковых графов системы

Элемент XTC	Вершины потоковых графов					
	ППГ	МПГО	МПГ по компонентам			ТПГ
			A	B	E	
Внешний источник питания	$i_1$	$M_{1m}$	$i_A$	$i_B$	Нет	$i_{1H}$
ТО смешения I	I	$M_1$	I	I	»	I
ТО химического превращения II	II	Нет	II	II	II	II
ТО диффузионного разделения III	III	$M_{III}$	III	Нет	Нет	III
ТО охлаждения IV	IV	Нет	Нет	»	»	IV
Внешний сток продукта	$s_4$	$s_{4m}$	$s_A$	»	$s_E$	$s_{4H}$
Фиктивный источник (сток) вещества	Нет	Нет	Сток	Сток	Источник	Нет
Фиктивный источник теплоты	»	»	$s_A^*$	$s_B^*$	$i_E^*$	Источник $i_H^*$

*Решение.* Составляем список параметров физических потоков данной XTC:

$$L_1 = \{m_1; x_{1A}; x_{1B}; H_1(t_1)\}; \quad L_2 = \{m_2; x_{2A}; x_{2B}; H_2(t_2)\};$$

$$L_3 = \{m_2; x_{3A}; x_{3E}; H_3(t_3)\}; \quad L_4 = \{m_4; x_{4A}; x_{4E}; H_4(t_4)\};$$

$$L_5 = \{m_5; x_{5A}; H_5(t_5)\}; \quad L_6 = \{m_5; x_{5A}; H_6(t_6)\}; \quad L_7 = \{m_7; H_7(t_7)\};$$

$$L_8 = \{m_7; H_8(t_8)\}.$$

Порядок построения ППГ, МПГО, МПГ по компонентам A, B и E, а также ТПГ поясняет табл. 4.1.

ППГ и МПГО рассматриваемой XTC приведены соответственно на рис. 4.13, б и рис. 4.13, в. Операторы III и IV не осуществляют преобразование общих массовых расходов физических потоков, поэтому соответствующих этим операторам вершин в МПГО не существует.

Различные МПГК и ТПГ рассматриваемой XTC изображены на рис. 4.14.

В МПГ по компоненте A (рис. 4.14, а) появляется внутренний сток  $s_A^*$ , соответствующий количеству компонента  $m_A^* = kx_{3A}x_{3B}V_p$ , вступившему в химическое превращение. В МПГ по компоненте B (рис. 4.14, б) внутренний сток

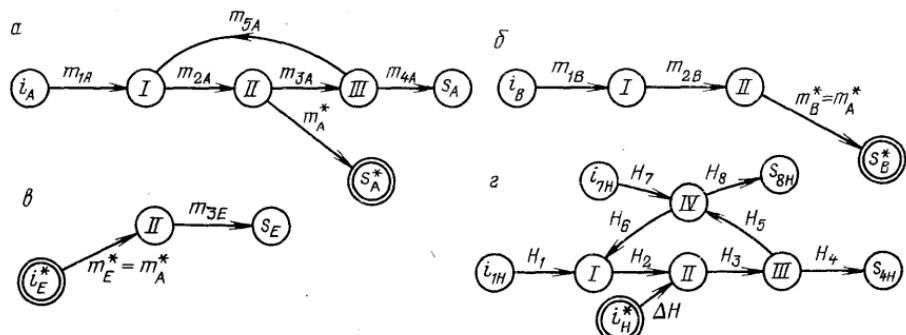


Рис. 4.14. Материальные потоковые графы по массовым расходам компонента A (α), компонента B (β), компонента E (γ); тепловой (γ) потоковый граф (обозначения см. на рис. 4.13)

$i_B^*$  отображает количество компонента  $B$ , вступившего в химическую реакцию. В МПГ по компоненте  $E$  (рис. 4.14,  $\delta$ ) внутренний источник  $i_E^*$  соответствует количеству химического компонента  $E$ , образовавшегося в химической реакции.

В ТПГ (рис. 4.14,  $\varepsilon$ ) внутренний источник  $i_H^*$  соответствует количеству тепла  $H$ , которое выделяется в результате экзотермической реакции.

Пример 4.2. Для ХТС, операторная схема которой представлена на рис. 4.15,  $a$ , построить МПГ по расходам химических компонентов  $A$ ,  $B$  и  $E$ . В операторах химического превращения  $II$

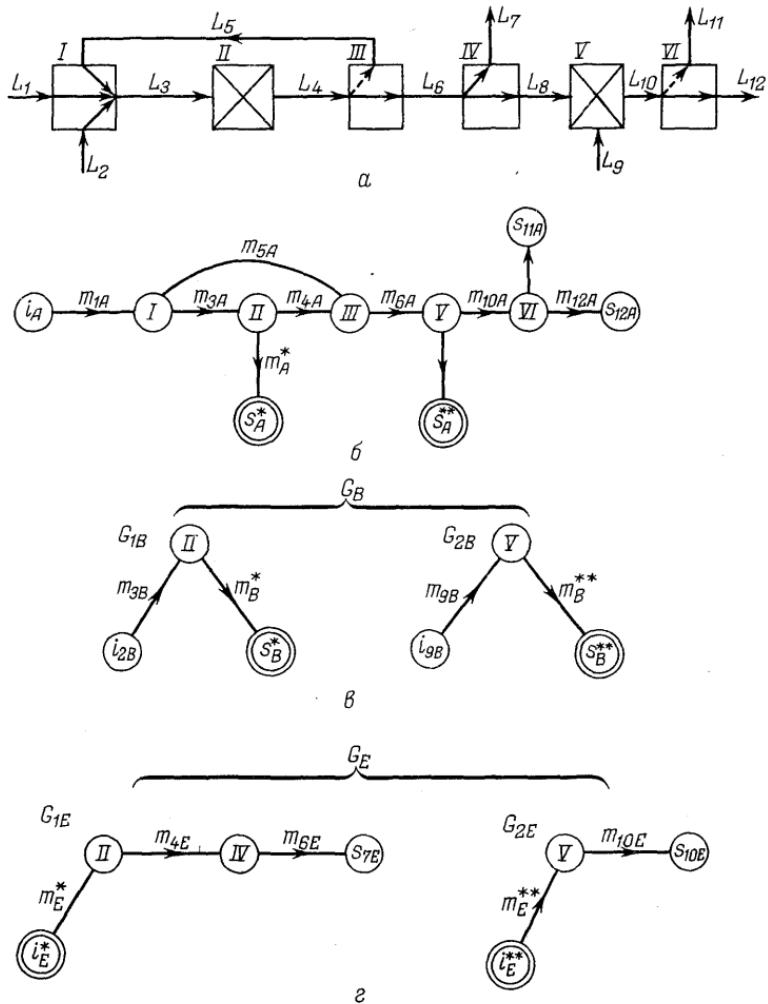


Рис. 4.15. Операторная схема ХТС (a) и материальные потоковые графы по массовому расходу компонентов  $A$  (б),  $B$  (в) и  $E$  (г):

I–IV—типовые технологические операторы

и  $V$  протекает химическая реакция:  $A + B \rightarrow E + \Delta H$ . Компонент  $A$  поступает в избытке по сравнению со стехиометрическим соотношением. Физическим потокам данной ХТС соответствуют следующие наборы параметров:

$$\begin{aligned} L_1 &= \{m_1 = m_{1A}\}; \quad L_2 = \{m_2 = m_{2B}\}; \quad L_3 = \{m_3; m_{3A}; m_{3B}\}; \\ L_4 &= \{m_4; m_{4A}; m_{4E}\}; \quad L_5 = \{m_5 = m_{5A}\}; \quad L_6 = \{m_6; m_{6A}; m_{6E}\}; \\ L_7 &= \{m_7 = m_{7E} = m_{6E}\}; \quad L_8 = \{m_8 = m_{8A} = m_{6A}\}; \quad L_9 = \{m_9 = m_{9B}\}; \\ L_{10} &= \{m_{10}; m_{10A}; m_{10E}\}; \quad L_{11} = \{m_{11} = m_{11A}\}; \quad L_{12} = \{m_{12}; m_{12A}; m_{12E}\}. \end{aligned}$$

*Решение.* Так как поток химического компонента  $A$  образует единую цепь между всеми элементами ХТС, то МПГ по массовому расходу компонента  $A$  является связанным графом (рис. 4.15, б).

Потоковые графы  $G_B$  и  $G_E$  по массовым расходам химических компонентов  $B$  и  $E$  (рис. 4.15, б и в) – несвязные графы. Каждый из этих МПГ состоит из двух связанных подграфов. Несвязный граф  $G_B$  (рис. 4.15, б) имеет две компоненты связности – связный подграф  $G_{1B}$  и связный подграф  $G_{2B}$ . В подграф  $G_{1B}$  входят вершины  $i_{2B}$ , II и  $s_B^*$ ; в подграф  $G_{2B}$  входят вершины  $i_{9B}$ , V и  $s_B^{**}$ . Подграф  $G_{1E}$  образован множеством вершин  $i_E^*$ , V и  $s_{12E}$ .

Пример 4.3. Построить ТПГ для процесса конденсации пара и процесса испарения жидкости.

*Решение.* ТПГ процесса конденсации и ТПГ процесса испарения изображены соответственно на рис. 4.16, а и б.

Выделение теплоты в процессе конденсации соответствует вершине – фиктивному источнику теплоты  $Q_{\text{конд}}^*$  в ТПГ (рис. 4.16, а); поглощение теплоты при испарении – вершине – фиктивному стоку теплоты  $Q_{\text{исп}}^*$  в ТПГ (рис. 4.16, б).

При построении ТПГ использованы следующие информационные переменные:  $t_r^u$  ( $t_x^u$ ) – начальная температура горячего (холодного) потока;  $t_r^k$  ( $t_x^k$ ) – конечная температура горячего (холодного) потока;  $H_r^u$  ( $H_x^u$ ) – энталпия горячего (холодного) потока при  $t_r^u$  ( $t_x^u$ );  $H_r^k$  ( $H_x^k$ ) – энталпия горячего (холодного) потока при  $t_r^k$  ( $t_x^k$ );  $H_n^u$  – энталпия пара при его начальной температуре  $t_n^u$ ;  $r_n$  – удельная теплота конденсации пара;  $r_i$  – удельная теплота испарения жидкости;  $Q_{\text{конд}}^*$  – количество теплоты, выделяемой при конденсации пара;  $Q_{\text{окл. конд}}$  – количество теплоты, необходимой для охлаждения конденсата;  $Q_{\text{окл. пара}}$  – количество теплоты, необходимой для охлаждения пара;  $Q_{\text{исп}}^*$  – количество теплоты, поглощаемой в процессе испаре-

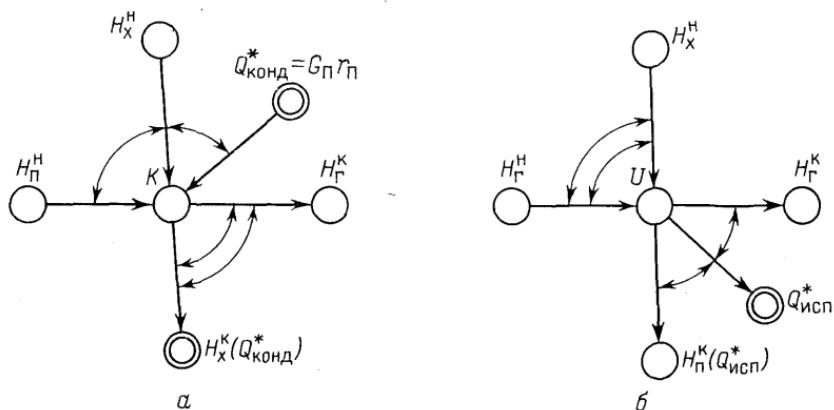


Рис. 4.16. Тепловые потоковые графы процессов конденсации (а) и испарения (б)

ния жидкости;  $Q_{\text{нагр.ж}}$  – количество теплоты, необходимой для нагрева жидкости;  $Q_{\text{нагр.пара}}$  – количество теплоты, необходимой для нагрева пара;  $G_n$  ( $G_*$ ) – расход пара (жидкости).

ТПГ процесса конденсации соответствует уравнению ТБ:

$$Q_{\text{окл.пара}} + Q_{\text{конд}} + Q_{\text{окл.конд}} = H_{\text{п}}^{\text{н}} - H_{\text{г}}^{\text{к}} + G_n r_{\text{п}} = H_{\text{x}}^{\text{н}} - H_{\text{x}}^{\text{к}}.$$

ТПГ процесса испарения соответствует уравнению ТБ:

$$H_{\text{п}}^{\text{k}} - H_{\text{x}}^{\text{k}} = H_{\text{г}}^{\text{n}} - H_{\text{г}}^{\text{k}} - G_* r_{\text{п}}.$$

Каждой дуге МПГ или ТПГ соответствует определенный вес  $W(e)$ , который равен величине расхода вещества или теплоты. Величину  $W(e)$  назовем *потоком по дуге* данного графа. Для каждой  $k$ -й промежуточной вершины МПГ или ТПГ можно записать «уравнение вершин» для потоков по дугам графа, инцидентных этой вершине:

$$\sum_{j=1}^e W_{jk} = 0, \quad (4.14)$$

или

$$\sum_{i=1}^p W_{ik} - \sum_{j=1}^{(e-p)} W_{kj} = 0,$$

где  $W_{jk}$  – потоки по  $j$ -й дуге, инцидентной  $k$ -й вершине;  $W_{ki}$  – поток по  $i$ -й дуге, входящей в  $k$ -ю вершину;  $W_{kj}$  – поток по  $j$ -й дуге, выходящей из  $k$ -й вершины графа.

Совокупность «уравнений вершин» для потоков по дугам графа (4.14), которые составлены для всех  $k$  промежуточных вершин, образует *систему независимых уравнений вершин данного графа*:

$$[S^*] \times [W^*] = 0, \quad (4.15)$$

где  $[W^*]$  – матрица-столбец потоков по всем дугам графа, порядок которой равен  $(e \times 1)$ ;  $[S^*]$  – матрица инциденций данного графа, порядок которой равен  $(k \times e)$ .

Нетрудно видеть, что матричное уравнение вершин МПГ или ТПГ (4.15) эквивалентно матричному уравнению материальных или тепловых балансов данной ХТС в целом (2.55).

Эквивалентность матричных уравнений (4.15) и (2.55) доказывает, что МПГ и ТПГ являются топологическими моделями, гомоморфными исследуемой ХТС.

Для всей ХТС можно записать общее уравнение вершин источников и вершин стоков МПГ или ТПГ системы:

$$\sum_m W_m(b) - \sum_n W_n(c) = 0, \quad (4.16)$$

где  $W_m(b)$  – поток по  $b$ -й дуге, инцидентной  $m$ -й вершине-источнику;  $W_n(c)$  – поток по  $c$ -й дуге, инцидентной  $n$ -й вершине-стоку;  $m$  – число вершин-источников;  $n$  – число вершин-стоков данного графа.

#### 4.4.5. Циклические потоковые графы

Циклические потоковые графы (ЦПГ) ХТС – это связные орграфы, полученные из соответствующего МПГ или ТПГ путем объединения всех вершин-источников и вершин-стоков этого графа в одну общую базовую (нулевую) вершину. Для базовой вершины циклического МПГ (ТПГ) справедливо уравнение баланса расхода вещества (теплоты) для ХТС в целом (4.16). ЦПГ  $G^* = (V, E)$ , который соответствует ПГ  $G(I, E)$ , имеющему  $m$  вершин-источников,  $n$  вершин-стоков,  $k$  смешанных вершин и  $e$  дуг, содержит число вершин ( $k + 1$ ) и число дуг  $e$ . Все вершины ЦПГ – это смешанные вершины.

Так, циклические материальные потоковые графы по общим массовым расходам физических потоков и по массовым расходам химического компонента  $A$  для ХТС, операторная схема которой изображена на рис. 4.13, *a*, представлены на рис. 4.17.

Для ХТС производства аммиака, технологическая схема которой представлена на рис. 1.5, *a* и операторная схема – на рис. 1.6, *б*, материальный потоковый граф по общим массовым расходам, материальный потоковый график по массовым расходам компонентов (азот) и тепловой потоковый график представлены на рис. 4.18. Нумерация вершин МПГО, МПГК и ТПГ соответствует номерам технологических операторов ХТС (рис. 1.6, *б*). На графах обозначены источники и стоки материальных и тепловых потоков:

*внешние источники:*  $G$ ,  $G_{N_2}$ ,  $Q_G$  – вход аммиачно-водородной смеси в систему (общий массовый расход, расход потока по компоненту  $N_2$ , тепловой поток);  $Q_{L^*}$  – тепловой поток, входящий в котел-утилизатор;  $Q_L^1$  – тепловой поток теплоносителя в теплообменник 3;  $Q_L^2$  – тепловой поток жидкого аммиака.

*внешние стоки:*  $L_1$ ,  $L_{1N_2}$ ,  $Q_L^1$  – выход жидкого аммиака из ХТС (общий массовый расход, расход по компоненту  $N_2$ , тепловой поток);  $Q_{G_2}$  – тепловой поток водяного пара из котла-утилизатора;  $Q_L$  – тепловой поток теплоносителя из теплообменника 3;  $Q_G$  – тепловой поток газообразного аммиака.

*Фиктивные источники:*  $Q_p^*$  – тепловой эффект экзотермической химической реакции;  $Q_{сж}^*$  – тепловой эффект за счет сжатия циркулирующего газа.

*Фиктивные стоки:*  $L_{pN_2}^*$  – материальный поток азота, расходуемого на хи-

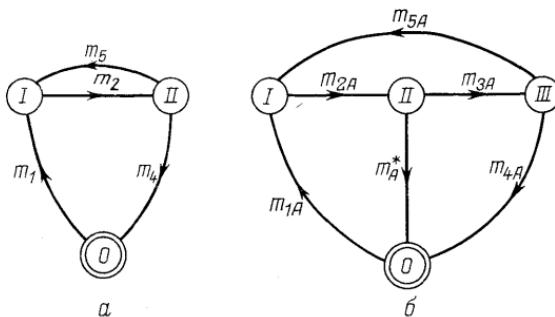


Рис. 4.17. Циклические материальные потоковые графы по общим массовым расходам физических потоков (*а*) и по массовым расходам химического компонента  $A$  (*б*) для ХТС, операторная схема которой представлена на рис. 4.13. *а*: 0 – базовая (нулевая) вершина

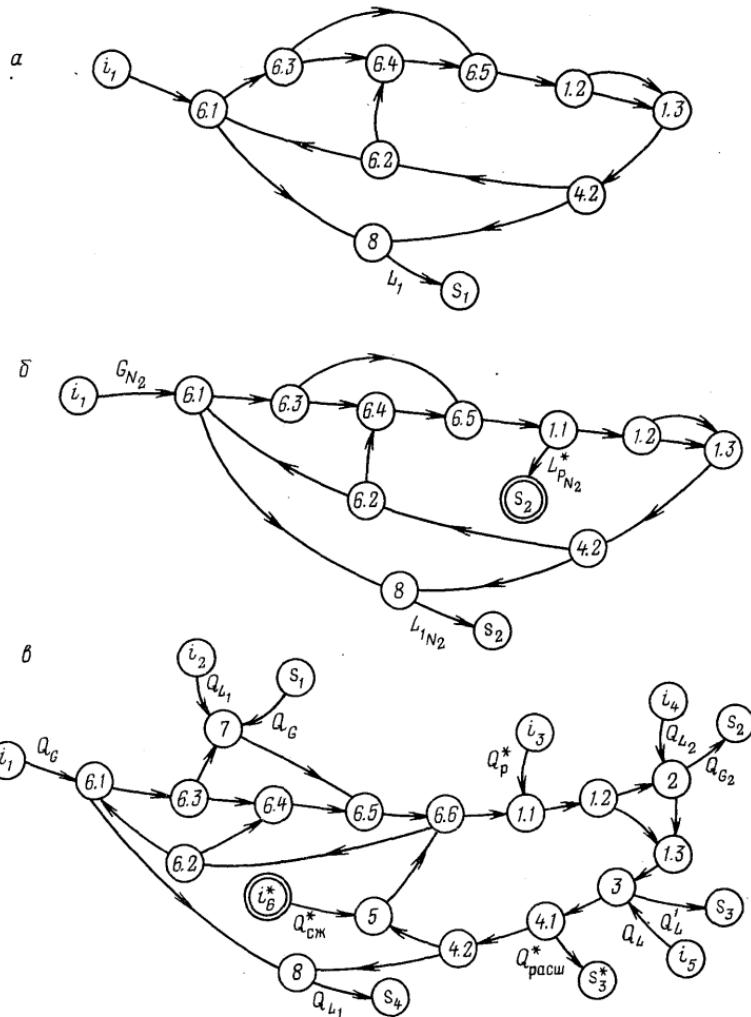


Рис. 4.18. Материальные и тепловые потоковые графы XTC синтеза аммиака:  
 $\alpha$ —материальный потоковый график по общим массовым расходам;  $\beta$ —материальный потоковый график по массовым расходам компонента (азот);  $\delta$ —тепловой потоковый график

мическую реакцию;  $Q_{\text{расш}}$  — тепловой эффект за счет снижения давления в конденсаторе.

Построение циклических МПГ и ТПГ позволяет формализовать процесс составления систем уравнений материальных и тепловых балансов XTC (см. раздел 5.1).

## 4.5. ИНФОРМАЦИОННО-ПОТОКОВЫЕ ГРАФЫ ХТС

**Информационно-потоковые графы (ИПГ).** ХТС – это взвешенные ненаправленные и направленные графы, отображающие информационную структуру систем уравнений ММ, т. е. логико-информационные связи либо между информационными переменными и уравнениями, либо между уравнениями математических моделей ХТС. Рассмотрим методику построения различных видов ИПГ (см. раздел 4.1).

### 4.5.1. Двудольные информационные графы

Двудольные информационные графы (ДИГ) – это взвешенные по вершинам неориентированные графы или орграфы, отображающие логико-информационные связи между информационными переменными и уравнениями математической модели ХТС. Множество вершин ДИГ  $V$  состоит из двух непересекающихся подмножеств: подмножества  $F$ -вершин, каждый  $j$ -й элемент которого соответствует уравнению  $f_j$ , или информационной связи ММ ( $f_j \in F$ ) и подмножества  $X$ -вершин, каждый  $i$ -й элемент которого соответствует  $x_i$  ИП ( $x_i \in X$ ):  $V = F \cup X$ ,  $F \cap X = \emptyset$ ,  $F = \{f_i | j = 1, M\}$ ;  $X = \{x_i | i = 1, N\}$ . Ребра неориентированного ДИГ отображают логическую взаимосвязь между уравнениями и ИП. Если  $i$ -я ИП  $x_i$  входит в  $j$ -е уравнение  $f_j$ , то в ДИГ существует ребро с вершинами  $x_i$  и  $f_j$ . Каждому неориентированному ДИГ системы уравнений ММ можно поставить в соответствие матрицу смежности  $[H] = [h_{ij}]$ , строки которой будут соответствовать  $f$ -вершинам, а столбцы –  $x$ -вершинам. Основные свойства неориентированного ДИГ:

- 1) любая цепь ДИГ, концами которой являются не принадлежащие к одному подмножеству вершины, содержит равное число  $f$ -вершин и  $x$ -вершин;
- 2) цикл графа содержит равное число  $f$ -вершин и  $x$ -вершин. Каждый цикл ДИГ отображает совместно замкнутую систему уравнений (см. раздел 3.2).

**Пример 4.4.** Построить неориентированный ДИГ системы уравнений ММ ( $N = 3$ ,  $M = 6$ ,  $F = M - N = 3$ ):

$$\left\{ \begin{array}{l} f_1(x_1, x_2, x_3) = 0; \\ f_2(x_3, x_4, x_5) = 0; \\ f_3(x_1, x_5, x_6) = 0. \end{array} \right.$$

Составить матрицу смежности  $[H]$  построенного ДИГ, определить степени вершин графа.

**Решение.** Неориентированный ДИГ системы уравнений представлен на рис. 4.19. Матрица смежности, соответствующая этому ДИГ, имеет следующий вид:

$$[H] = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 \\ f_1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ f_2 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ f_3 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Степени вершин неориентированного ДИГ равны соответственно:

$$\rho(f_1) = \rho(f_2) = \rho(f_3) = 3;$$

$$\rho(x_1) = \rho(x_3) = \rho(x_5) = 2;$$

$$\rho(x_2) = \rho(x_4) = \rho(x_6) = 1.$$

Ориентированный ДИГ  $G(V, U)$  отображает алгоритм стратегии решения СУ на основе свойства разрешимости уравнений с применением способов декомпозиции СУ и разрывов информационных переменных (см. раздел 3.2). Для разработки алгоритмов стратегии решения систем уравнений ММ исходный неориентированный ДИГ, отображающий данную СУ, преобразуют в ориентированный ДИГ с использованием следующих правил:

1) если информационную переменную  $x_i$  рассматривают как выходную переменную  $f_j$  уравнения ММ, то ребро ДИГ  $\bar{U}_{ji}(f_j, x_i)$  ориентируют из вершины  $f_j$  к вершине  $x_i$ . Все другие ребра, инцидентные этой  $f_j$  вершине, направляют к этой вершине графа;

2) на основе свойства разрешимости СУ (см. раздел 3.2) каждая  $f_j$  вершина ориентированного ДИГ может иметь только единственную выходную ветвь, отображающую наличие единственной выходной переменной для уравнения  $f_j$ ;

3) вершина  $x_k$ , соответствующая свободной информационной переменной СУ, имеет только лишь выходные ветви;

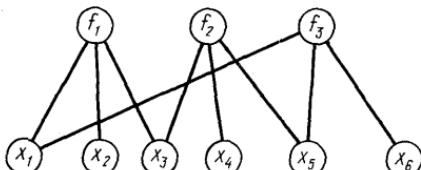


Рис. 4.19. Неориентированный двудольный информационный граф системы уравнений

4) вершина  $x_n$ , соответствующая базисной информационной переменной  $x_n$ , которая входит в  $k$  уравнений ММ, имеет одну входную ветвь и  $(k - 1)$  выходных ветвей;

5) если вершина  $f_j$  висячая, то ей должна быть инцидентна только одна выходная ветвь  $\bar{U}_{jk} = (f_j, x_k)$ , так как базисная информационная переменная  $x_k$  определяется как выходная переменная уравнения  $f_j$ ;

6) если вершина  $x_i$  висячая и не соответствует свободной информационной переменной СУ, то она должна иметь единственную выходную ветвь;

7) если вершина  $x_i$  висячая и соответствует свободной информационной переменной СУ, то она должна иметь единственную выходную ветвь;

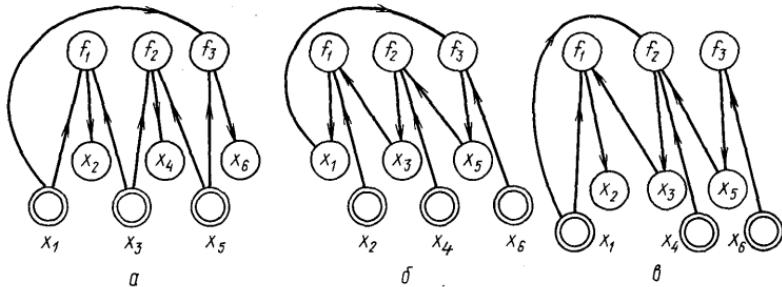


Рис. 4.20. Ориентированные двудольные информационные графы системы уравнений, соответствующие наборам свободных информационных переменных:  
 $\alpha = \{x_1, x_3, x_5\}$ ;  $\beta = \{x_2, x_4, x_6\}$ ;  $\gamma = \{x_1, x_4, x_6\}$ .

веннную входную ветвь, инцидентную некоторой  $f_j$  вершине, так как переменная  $x_i$  является выходной переменной уравнения  $f_j$ ;

7) вершины  $x_i$ , отображающие свободные информационные переменные, могут в ориентированном ДИГ не изображаться, чтобы не усложнять его конфигурацию.

Пример 4.5. Построить ориентированные ДИГ, соответствующие неориентированному ДИГ, изображеному на рис. 4.19, для трех вариантов наборов свободных информационных переменных ХТС:

$$(x_1; x_3; x_5); \quad (x_2; x_4; x_6) \quad \text{и} \quad (x_1; x_4; x_6).$$

*Решение.* В первом варианте СВИП являются переменные  $x_1, x_3, x_5$ , попарно входящие в каждое из уравнений ММ. В результате этого получают ориентированный ДИГ, из которого следует, что все три уравнения ММ можно решать одновременно и независимо одно от другого (рис. 4.20, а).

Так как во втором варианте СВИП выбраны непарные переменные  $x_2, x_4, x_6$ , то ориентированный ДИГ (рис. 4.20, б) содержит контур. Этот контур указывает на необходимость одновременного решения совместно замкнутой СУ с проведением одного разрыва, или одной итерационной процедуры по любой из переменных  $x_1, x_3$  или  $x_5$ . Стратегия решения СУ стала неопределенной.

В третьем варианте, так как СВИП выбраны  $x_1, x_4$  и  $x_6$ , то ориентированный ДИГ (рис. 4.20, в) не содержит контура. Стратегия решения совместно разомкнутой СУ в этом случае вполне однозначна: 1) решают уравнение  $f_3$  относительно выходной переменной  $x_5$ ; 2) решают уравнение  $f_2$  относительно выходной переменной  $x_3$ ; 3) решают уравнение  $f_1$  относительно переменной  $x_2$ .

#### 4.5.2. Информационные графы

Информационные графы (ИГ) – это взвешенные по вершинам и дугам орграфы, отображающие алгоритм стратегии решения СУ математической модели на основе свойства разрешимости уравнения относительно информационных переменных с использованием способа декомпозиции СУ и разрывов ИП при некотором определенном наборе СВИП и выходных переменных (см. раздел 3.2). ИГ строят по соответствующим ориентированным ДИГ.

Вершины ИГ соответствуют уравнениям ММ, а также источникам и приемникам информации (см. раздел 3.2). Ветви ИГ отображают информационные потоки, которые соответствуют информационным переменным СУ (см. разделы 2.5 и 3.1).

Ветвь ИГ, соответствующая  $z_i$  выходной переменной некоторого  $f_i$  уравнения ММ, выходит из  $f_i$  вершины ИГ, которая соответствует этому уравнению. Число ветвей, соответствующих  $z_i$  выходной переменной данного  $f_j$  уравнения, равно числу уравнений ММ, для которых эта переменная  $z_i$  является входной переменной. Ветви, соответствующие СВИП, выходят из вершин ИГ, которые отображают источники информации.

Вершинам ИГ, отображающим приемники информации, инцидентны входные ветви, которые отображают базисные информационные переменные ХТС, не являющиеся входными переменными ни для одного уравнения модели.

Информационные графы СУ могут быть как ациклическими, так и циклическими. Ациклический информационный граф СУ не содержит ни одного контура и отображает стратегию решения совместно разомкнутой СУ, которая состоит из строго соподчиненных уравнений (см. раздел 3.2). Циклический информационный граф СУ содержит хотя бы один контур и отображает стратегию решения СУ, при которой существует хотя бы одна совместно замкнутая подсистема уравнений.

Каждой СУ, имеющей степень свободы в общем случае может соответствовать целое множество циклических ИГ, которое определяется множеством возможных наборов свободных информационных переменных и выходных переменных уравнений. Оптимальным циклическим информационным графом СУ называют такой циклический ИГ, для которого размер максимального контура графа наименьший (см. раздел 3.2). Таким образом, оптимальность циклического ИГ определяется не числом контуров, а их размером. Для упрощения конфигурации ИГ в ряде случаев вершины-источники могут не изображаться.

Для разработки стратегии решения совместно замкнутых СУ (см. раздел 3.2), отображаемых циклическими ИГ, которые также называют бикомпонентами, используют способ разрыва выходных переменных (см. раздел 3.2), который позволяет преобразовать исходный циклический ИГ в упорядоченный по слоям вершин эквивалентный ациклический ИГ (см. разделы 2.5 и 3.2). Упорядоченный по слоям вершин ациклический орграф – это такой связный орграф без контуров, в котором все вершины-источники принадлежат нулевому слою (уровню)  $E_0$ , а все другие смешанные вершины и вершины-стоки расположены по слоям (уровням)  $-E_1, E_2, \dots, E_n$  таким образом, что номер каждого слоя вершин  $E_k$  равен максимальной длине элементарного пути  $k$  от вершин-источников, принадлежащих слою  $E_0$ , до любой вершины, принадлежащей слою вершин  $E_k$ . Так, упорядоченный по

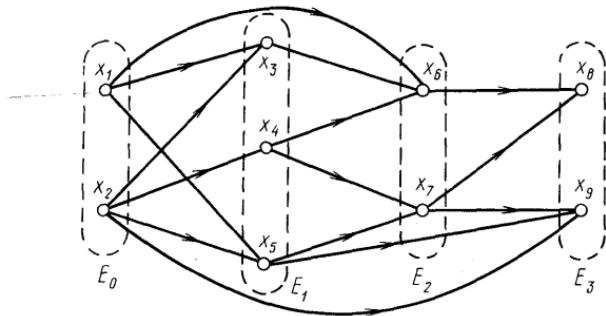


Рис. 4.21. Упорядоченный по слоям вершин ациклический орграф

слоям вершин ациклический орграф представлен на рис. 4.21 (орграф содержит четыре слоя вершин).

**Пример 4.6.** Используя систему уравнений, рассмотренную в примерах 4.4 и 4.5, для трех вариантов наборов свободных информационных переменных:  $(x_1, x_3, x_5)$ ;  $(x_2, x_4, x_6)$ ;  $(x_1, x_4, x_6)$ , построить соответствующие ИГ; для циклического ИГ построить упорядоченный по слоям вершин эквивалентный ациклический ИГ.

**Решение.** Построение ИГ для заданных вариантов наборов СВИП (см. рис. 4.22) проводят на основе рассмотрения соответствующих ориентированных ДИГ, изображенных на рис. 4.19. Информационный граф СУ при наборе СВИП  $(x_1, x_4, x_6)$  является ациклическим графом (рис. 4.22, б). ИГ при наборе СВИП  $(x_2, x_4, x_6)$ ,

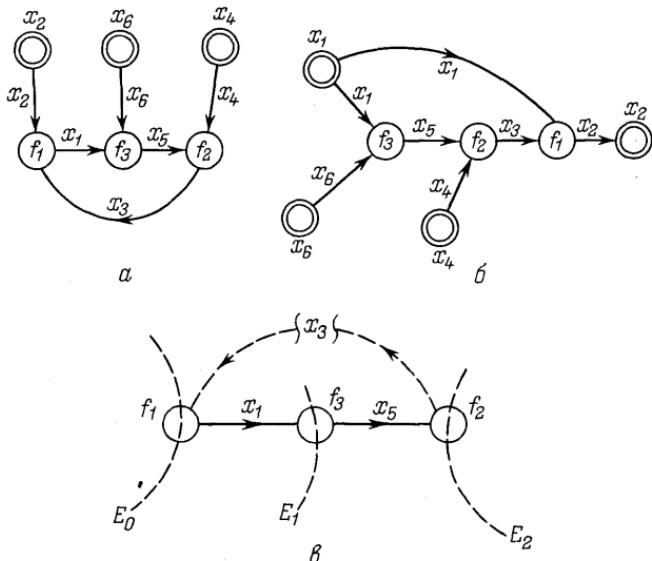


Рис. 4.22. Информационные графы системы уравнений, соответствующие наборам свободных информационных переменных:

а –  $\{x_2, x_4, x_6\}$ ; б –  $\{x_1, x_4, x_6\}$ ; б' – упорядоченный эквивалентный ациклический ИГ, соответствующий циклическому ИГ

$x_4, x_6$ ) является циклическим ИГ (рис. 4.22, а). ИГ, соответствующий набору СВИП ( $x_1, x_3, x_5$ ) совпадает с ориентированным ДИГ (см. рис. 4.20, а). Упорядоченный эквивалентный ациклический ИГ, соответствующий циклическому ИГ (см. рис. 4.22, а), представлен на рис. 4.22, в (разрыв осуществлен по переменной  $x_3$ ; выделено три слоя вершин:  $E_0, E_1, E_2$ ).

В ряде случаев к классу ИПГ относят также информационно-потоковые мультиграфы (ИПМГ), которые соответствуют логико-информационным схемам ХТС (см. раздел 3.1.). Вершины ИПМГ отображают информационные операторы элементов ХТС, а дуги – информационные потоки.

## 4.6 СИГНАЛЬНЫЕ ГРАФЫ ХТС

**Сигнальные графы ХТС** – это взвешенные орграфы, соответствующие линейным системам уравнений ММ и отображающие причинно-следственные и информационно-параметрические связи между информационными переменными СУ. Вершины СГ соответствуют информационным переменным СУ, или сигналам ХТС. СГ соответствуют причинно-следственным связям между сигналами. Каждая ветвь СГ имеет некоторый вес, равный коэффициенту, характеризующему информационно-параметрическую связь между сигналами. Направление ветви указывается от вершины, отображающей сигнал-причину к вершине, отображающей сигнал-следствие.

Вершины-истоки СГ отображают свободные ИП (источники сигналов). Вершины-стоки отображают зависимые (базисные) переменные ХТС (стоки сигналов). Смешанные вершины, как и вершины-стоки, соответствуют зависимым переменным ХТС и называются зависимыми вершинами СГ.

СГ принципиально упрощают определение функциональных взаимосвязей между переменными (сигналами) ХТС, входящими в СУ математических моделей, представленных в виде совокупностей матриц преобразования элементов ХТС (см. раздел 3.5). Основное преимущество СГ при их использовании для решения указанной задачи помимо их наглядности состоит в том, что объем вычислительных операций для определения соответствующих сигналов ХТС при помощи формальных алгоритмов эквивалентного преобразования СГ (см. раздел 5.2) близок к минимальному по сравнению с объемом вычислительных операций при использовании достаточно громоздких методов линейной алгебры.

СУ математических моделей ХТС выражают количественные соотношения между сигналами ХТС и не позволяют легко обнаружить особенности и характер причинно-следственных и информационно-параметрических связей между сигналами. Использование СГ, отображающих СУ, в ряде случаев позволяет различные по физико-химической сущности ХТП представить

в виде одной и той же структуры прохождения и преобразования сигналов, что приводит к весьма важным обобщениям о функционировании данных ХТС.

После того, как СГ для СУ построен, возникает задача решения СГ. Решение СГ – это процедура определения значений эквивалентных коэффициентов передач между любой вершиной-источником и зависимой вершиной, либо между любыми зависимыми вершинами СГ, которая осуществляется в результате или эквивалентного преобразования структуры исходного СГ (удаления вершин, контуров и петель), или анализа структуры исходного СГ.

Любые преобразования структуры исходного СГ с целью получения простого равносильного СГ соответствуют определенным эквивалентным преобразованиям СЛУ, отображаемой этим исходным СГ.

Ранее было отмечено, что для одной и той же системы уравнений ХТС можно построить множество равносильных СГ.

Равносильные, или эквивалентные СГ могут отличаться один от другого структурой и коэффициентами передачи ветвей. Приведение СГ одной структуры к равносильному СГ другой структуры называют *преобразованием СГ*. Как правило, СГ преобразуются с целью упрощения процедур их решения, однако преобразование СГ может преследовать и другие цели, определяемые условием задачи анализа ХТС, например, достижение большей наглядности или выявление взаимосвязей между какими-либо сигналами. Преобразованный исходный СГ, являющийся простым СГ, который не допускает дальнейшего исключения вершин, контуров и петель, называется *конечным СГ*. Для получения конечного СГ необходимо иметь правила и алгоритмы, позволяющие исключать вершины и петли исходного СГ (см. раздел 5.2).

При построении СГ по исходной СЛУ, записанной в причинно-следственной форме, используют следующие правила: 1) сигналы передаются вдоль ветвей только в направлении их ориентации; 2) сигнал, проходящий вдоль какой-либо ветви, умножается на коэффициент передачи этой ветви; 3) сигнал, изображаемый какой-либо зависимой вершиной, является алгебраической суммой всех сигналов, поступающих в эту вершину только по входным ветвям; 4) величина сигнала, изображаемого какой-либо зависимой вершиной или вершиной-истоком, передается по всем ветвям, выходящим из данной вершины.

В соответствии с этими правилами величина сигнала в любой зависимой вершине СГ определяется следующим образом (рис. 4.23):

$$x_k = \sum_{i=1}^N a_{ki} x_i, \quad (4.17)$$

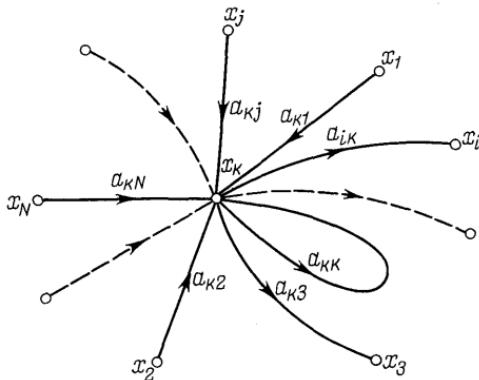


Рис. 4.23. Сигнальный граф

где  $x_k$  – величина сигнала в  $k$ -й зависимой вершине СГ;  $x_i$  –  $i$ -я вершина, из которой выходящая дуга с передачей  $a_{ki}$  направлена в вершину  $x_k$ ;  $N$  – число вершин, связанных выходными ветвями с  $k$ -ым узлом;  $a_{ki}$  – коэффициент передачи ветви, выходящей из  $i$ -й вершины и входящей в  $k$ -ю зависимую вершину ( $i = 1, N$ ).

Величина сигнала  $x_k$  не зависит от выходящих из  $k$ -й вершины ветвей СГ.

Для заданной СЛУ, представленной в скалярной форме

$$\sum_{j=1}^N a_{ij}x_j = b_i, \quad i = \overline{1, N}, \quad m - \text{число } b_i \neq 0 \quad (4.18)$$

или в матричной форме

$$[A] \times [X] = [B], \quad (4.19)$$

где  $[A]$  – квадратная матрица системы порядка  $N$ ;  $[X]$  – матрица-столбец неизвестных размера  $(N \times 1)$ ;  $[B]$  – матрица-столбец свободных членов размера  $(N \times 1)$ , причем  $m$  – число  $b_i \neq 0$  ( $m < N$ ;  $m = 0$  – для однородной СЛУ);

можно построить множество эквивалентных ИСГ. Выделяют два вида СГ: нормализованные и ненормализованные ИСГ, которые различаются правилами эквивалентного преобразования исходной СЛУ (4.18) или (4.19) к различным причинно-следственным формам преобразования на основе свойства разрешимости каждого уравнения СЛУ (см. раздел 3.2).

**Нормализованный сигнальный граф (НСГ)** отображает *нормализованную СЛУ*, которая получена из исходной СЛУ (4.18) в результате того, что каждое  $i$ -е уравнение СЛУ разрешено относительно  $k$ -й выходной информационной переменной  $x_k$  в явной причинно-следственной форме (в общем случае  $i \neq k$ )

$$x_i = \sum_{j=1}^N \left( -a_{ij}/a_{ii} \right) x_j + (1/a_{ii}) b_i, \quad (j \neq i), \quad (4.20)$$

где  $x_i$  – зависимые вершины НСГ;  $b_i$  – вершины-истоки НСГ;  $(-a_{ij}/a_{ii})$  – коэффициент передачи ветвей НСГ между зависимыми вершинами;  $(1/a_{ii})$  – коэффициент передачи ветвей НСГ, выходящих из вершины.

Нормализованной СЛУ, каждое уравнение которой имеет вид (4.20), будет соответствовать нормализованная матрица коэффициентов передач ветвей НСГ!

$$[\tilde{A}_n] = \begin{bmatrix} 0 & \tilde{a}_{12} \dots \tilde{a}_{1(N-1)} & \tilde{a}_{1N} & \tilde{a}_{1(N+1)} & 0 & \cdots 0 \\ \tilde{a}_{21} & 0 & \cdots \tilde{a}_{2(N-1)} & \tilde{a}_{2N} & 0 & \tilde{a}_{N(N+N)} \cdots 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \tilde{a}_{N1} & \tilde{a}_{N2} & \tilde{a}_{N(N-1)} & 0 & 0 & 0 \\ & & & & & \tilde{a}_{N(N+N)} \end{bmatrix}, \quad (4.21)$$

где коэффициенты  $\tilde{a}_{ik}$  определяются следующим образом:

$$\left. \begin{array}{l} \tilde{a}_{ij} = -a_{ij}/a_{ii} \quad (i \neq j; i = \overline{1, N}, j = \overline{1, N}; a_{jj} = 0); \\ \tilde{a}_{i(N+k)} = 0 \quad (k \neq i; k = \overline{1, m}; m \leq N); \\ \tilde{a}_{i(N+k)} = 1/a_{ii} \quad (k = i; i = \overline{1, N}). \end{array} \right\} \quad (4.22)$$

Матрице  $[\tilde{A}_n]$  соответствует нормализованная СЛУ в матричной форме, которая отображается НСГ:

$$[X] = [\tilde{A}_n] \times \begin{bmatrix} X \\ B \end{bmatrix}, \quad (4.23)$$

где  $[X]$  – матрица-столбец неизвестных, которые в НСГ соответствуют зависимым вершинам;  $[B]$  – матрица-столбец свободных членов, которые в НСГ отображаются вершинами-истоками;  $[\tilde{A}_n]$  – нормализованная матрица коэффициентов ветвей НСГ размера  $[N \times (N + m)]$ , отображающая информационно-параметрические связи между вершинами НСГ.

Так как в  $[\tilde{A}_n]$  все элементы главной диагонали  $\tilde{a}_{jj} = 0$  ( $j = \overline{1, N}$ ), в НСГ при зависимых вершинах отсутствуют петли. Для изображения НСГ, соответствующего нормализованной СЛУ (4.20) или (4.23) с нормализованной матрицей  $[\tilde{A}_n]$  (4.21), выполняют следующие операции:

1) наносят  $(N + m)$  вершин НСГ:  $m$  вершин-источников, отображающих независимые сигналы  $b_i$ , и  $N$  зависимых вершин, отображающих базисные переменные  $x_i$ ;

2) изображают дуги между вершинами-источниками и зависимыми вершинами, коэффициенты которых равны  $\tilde{a}_{i(N+k)}$ , а также дуги между зависимыми вершинами  $x_j$  и  $x_i$  с коэффициентами  $\tilde{a}_{ij}$ .

Для однородной СЛУ ( $b_i = 0, i = \overline{1, N}$ ) матрицу  $[\tilde{A}_n^*]$  можно составить непосредственно по матрице СЛУ при помощи равенства:

$$[\tilde{A}_n^*] = [D] \times [A] + [E_N], \quad (4.24)$$

где  $[A]$  – квадратная матрица исходной СЛУ;  $[D] = [d_{ij}]$  – диагональная матрица, составленная из соответствующих и противоположных по знаку обратных диаго-

нальных элементов матрицы  $[A]$ , т. е. элементы  $d_{ij}$  равны:

$$d_{ii} = -1/a_{ii}; \quad d_{ik} = 0, \quad \text{если } i \neq k \quad (i = \overline{1, N}).$$

Для неоднородных СЛУ общая формула для  $[\tilde{A}_n]$  оказывается громоздкой и неудобной при использовании. В этих случаях целесообразно разрешить каждое уравнение относительно каждой нормализованной неизвестной по соотношению (4.20).

Пример 4.7. По заданной СУ вида:

$$\begin{aligned} x_1 - b_1 &= 0; \\ a_{21}x_1 - x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 &= 0; \\ a_{32}x_2 - x_3 &= 0; \\ a_{41}x_1 + a_{43}x_3 - a_{44}x_4 &= 0, \end{aligned}$$

не составляя матрицы  $[\tilde{A}_n]$  в явном виде, построить НСГ, в котором определить вершины-истоки, стоки и смешанные вершины. Составить по НСГ матрицу  $[\tilde{A}_n]$  и матрицу смежности  $[H]$ .

*Решение.* Определяем число вершин НСГ:  $v = N + m = 4 + 1 = 5$ . Наносим вершины изображаемого НСГ (рис. 4.24, *a*) и нумеруем их. Далее последовательно выражаем выходные переменные из уравнений СЛУ, причем возможно много вариантов, которые приведут к соответствующему числу равносильных НСГ. Выберем один из возможных вариантов. Из первого и второго уравнений:  $x_1 = b_1$ ;  $x_2 = a_{21}x_1 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4$ . Подграфы, соответствующие этим равенствам, показаны на рис. 4.24, *b*, *c*.

Аналогично находим из третьего и четвертого уравнений СЛУ:  $x_3 = a_{32}x_2$ ;  $x_4 = (a_{41}/a_{44})x_1 + (a_{43}/a_{44})x_3$ ;  $\tilde{a}_{41} = a_{41}/a_{44}$ ;  $\tilde{a}_{43} = a_{43}/a_{44}$  (рис. 4.24, *c*, *d*). Объединяя все подграфы, получаем НСГ (рис. 4.24, *e*), соответствующий заданной

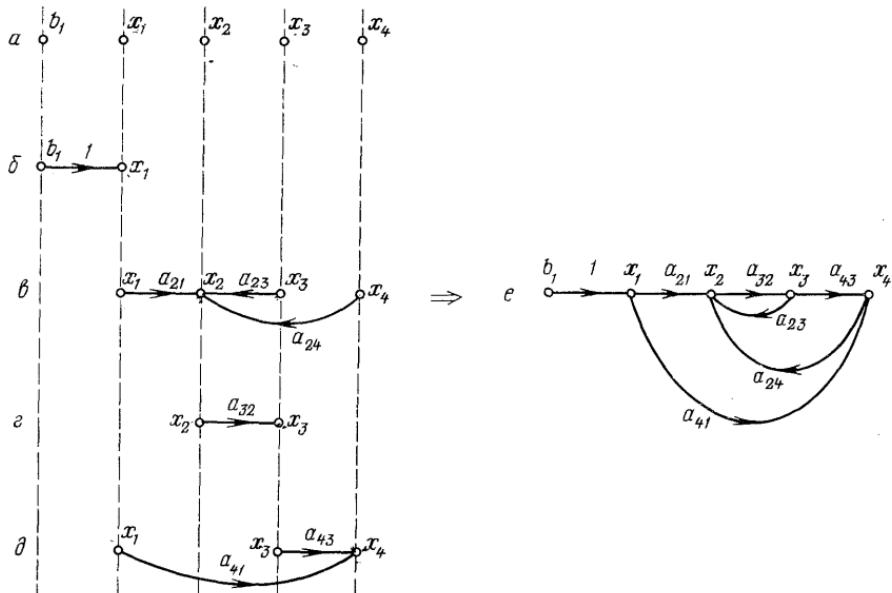


Рис. 4.24. Основные процедуры построения нормализованного сигнального графа

СЛУ, в котором вершина  $b_1$  является истоком, а остальные вершины – смешанные; вершина-сток отсутствует.

Матрицы  $[\tilde{A}_H]$  и  $[H]$ , соответствующие ННСГ (рис. 4.24, e) записываются следующим образом:

$$[\tilde{A}_H] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ a_{21} & 0 & a_{23} & a_{24} & 0 \\ 0 & a_{32} & 0 & 0 & 0 \\ a_{41} & 0 & a_{43} & 0 & 0 \end{bmatrix}; [H] = \begin{bmatrix} b_1 & x_1 & x_2 & x_3 & x_4 \\ x_1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ x_2 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ x_3 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ x_4 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

**Ненормализованный сигнальный граф (ННСГ)** отображает ненормализованную СЛУ, полученную из исходной СЛУ (4.18) в результате применения какого-либо эквивалентного преобразования, при котором каждое  $i$ -е уравнение СЛУ неявно разрешено относительно  $k$ -й выходной переменной  $x_k$  (в общем случае  $i \neq k$ ) в неявной причинно-следственной форме:

$$x_i = (a_{ii} + 1)x_i + \sum_{j=1}^N a_{ij}x_j + (-1)b_i, \quad (j \neq i, i = \overline{1, N}), \quad (4.25)$$

где  $x_i$  – сигнал, отображаемый зависимой вершиной ННСГ ( $i = \overline{1, N}$ );  $b_i$  – независимый сигнал, отображаемый вершиной-истоком ( $i = 1, m$ ;  $m \leq N$ ;  $m = 0$ );  $(a_{ii} + 1)$  – коэффициент петли, инцидентной зависимой вершине  $x_i$ ;  $a_{ij}$  – коэффициент дуги, отображающей информационно-параметрическую связь зависимых вершин  $x_j$  и  $x_i$ ;  $(-1)$  – коэффициент дуги, выходящей из вершины-истока.

В матричной форме ненормализованная СЛУ (4.25) имеет вид

$$[X] = \left[ ([A] + [E_N]) \begin{array}{|c} \hline -[E_m] \\ \hline \overline{0}_{(N-m)m} \end{array} \right] \times \begin{bmatrix} X \\ B_m^* \end{bmatrix}, \quad (4.26)$$

где  $[B_m^*]$  – столбец, в который входят лишь ненулевые свободные члены, т. е.  $b_i \neq 0$  ( $i = 1, m$ );  $[E_N]$  ( $[E_m]$ ) – единичная матрица порядка  $N(m)$ ;  $\overline{0}_{(N-m)m}$  – нулевая матрица размера  $((N-m) \times m)$ .

Ненормализованная матрица коэффициентов передач ветвей ННСГ размерностью  $[N \times (N+m)]$  имеет вид:

$$[\tilde{A}_{HH}] = \left\{ \begin{array}{cc|cc} \overbrace{(a_{11}+1) & a_{12} & \cdots & a_{1N}}^N & \overbrace{-1 & 0 & \cdots & 0}^m \\ a_{21} & (a_{22}+1) & \cdots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & a_{N2} & \cdots & (a_{NN}+1) \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} m \\ (N-m), \end{array} \right\} \quad (4.27)$$

где  $m$  – число ненулевых свободных членов;  $-[E_m]$  – единичная подматрица порядка  $m$ , умноженная на  $-1$ ;  $[0_{(N-m) \times m}]$  – нулевая подматрица размера  $[(N-m) \times m]$ .

Ненормализованная матрица  $[\tilde{A}_{\text{нн}}^*]$ , соответствующая ННСГ однородной СЛУ, имеет вид:

$$[\tilde{A}_{\text{нн}}^*] = [[A] + [E_N]], \quad (4.28)$$

где  $[A]$  – квадратная матрица однородной СЛУ порядка  $N$ .

Ненормализованная матрица  $[A_{\text{нн}}]$  (4.24) и ненормализованная матрица  $[\tilde{A}_{\text{нн}}]$  (4.27) отличаются одна от другой, так как они получены с применением различных эквивалентных преобразований одной и той же исходной СЛУ (4.19), однако построенные НСГ и ННСГ для одной и той же СЛУ (4.19) будут равносильными, или эквивалентными СГ.

Необходимо отметить, что изложенный способ построения НСГ по СЛУ (4.19), вытекающий из уравнения (4.20), является единственным. Для построения ННСГ можно предложить разнообразные способы, соответствующие различным способам эквивалентного преобразования СЛУ (4.18) вида  $x_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_i, x_j, \dots, x_N)$ .

Так как коэффициенты передачи ветвей ННСГ численно равны коэффициентам СЛУ, то построить ННСГ весьма просто. Однако конфигурация ННСГ по сравнению с конфигурацией

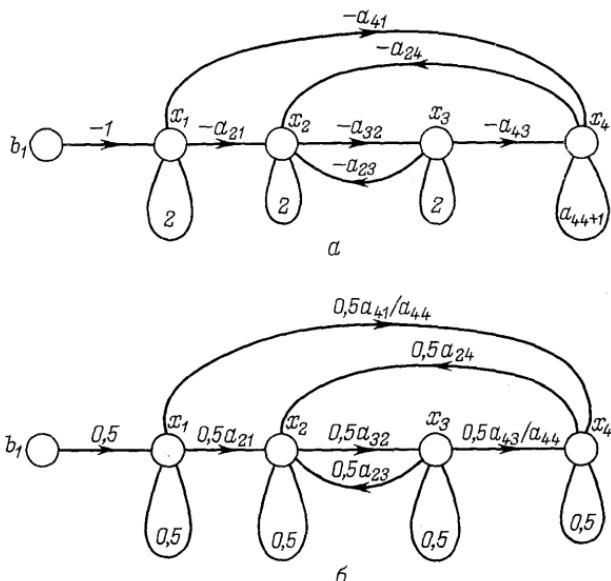


Рис. 4.25. Ненормализованный СГ, соответствующий матрице  $\tilde{A}_{\text{нн}}^*$  (а) и эквивалентный ННСГ (б)

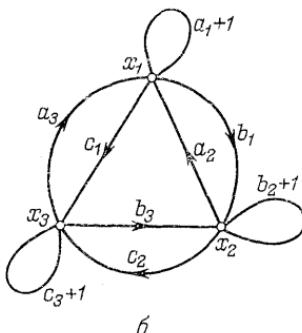
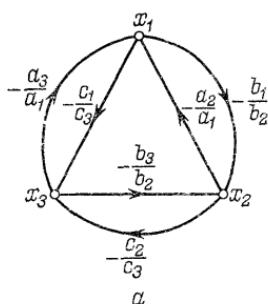


Рис. 4.26. Нормализованный (а) и ненормализованный (б) сигнальные графы к примеру 4.9.

ННСГ намного сложнее из-за наличия петель при зависимых вершинах.

Пример 4.8. Для СЛУ рассмотренной в примере 4.7, построить два эквивалентных, или равносильных ННСГ с использованием и без использования соотношения (4.25). С использованием соотношения (4.25) записать выражение матрицы  $[\tilde{A}_{\text{нн}}]$  (4.27).

*Решение.* С использованием для построения ННСГ выражения (4.25) матрица  $[\tilde{A}_{\text{нн}-1}]$  (4.27) имеет вид:

$$[\tilde{A}_{\text{нн}-1}] = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -a_{21} & 2 & -a_{23} & -a_{24} & 0 \\ 0 & -a_{32} & 2 & 0 & 0 \\ -a_{41} & 0 & -a_{43} & (a_{44}+1) & 0 \end{bmatrix} \quad (4.29)$$

Ненормализованный СГ, соответствующий матрице  $[\tilde{A}_{\text{нн}-1}]$ , изображен на рис. 4.25, б.

Для эквивалентного ННСГ (см. рис. 4.25, б), построенного в соответствии с другим эквивалентным преобразованием  $i$ -го уравнения СЛУ:  $x_i = 0,5(x_i + \sum_{j=1}^N (-a_{ij}/a_{ii})x_j + (1/a_{ii})b_i)$ , матрица  $[\tilde{A}_{\text{нн}-2}]$  имеет вид:

$$[\tilde{A}_{\text{нн}-2}] = \begin{bmatrix} 0,5 & 0 & 0 & 0 & 0,5 \\ 0,5 \cdot a_{21} & 0,5 & 0,5 \cdot a_{23} & 0,5 \cdot a_{24} & 0 \\ 0 & 0,5 \cdot a_{32} & 0,5 & 0 & 0 \\ 0,5 \frac{a_{41}}{a_{44}} & 0 & 0,5 \frac{a_{43}}{a_{44}} & 0,5 & 0 \end{bmatrix}.$$

Пример 4.9. Построить нормализованный и ненормализованный сигнальные графы для однородной СЛУ:

$$\begin{aligned} a_1 x_1 + a_2 x_2 + a_3 x_3 &= 0; \\ b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 &= 0; \\ c_1 x_1 + c_2 x_2 + c_3 x_3 &= 0. \end{aligned}$$

Составить матрицы  $[\tilde{A}_n]$  и  $[\tilde{A}_{nn}]$ , построить НСГ и ННСГ.

*Решение.* Для построения НСГ составим матрицу  $[\tilde{A}_n^*]$  (4.24) следующего вида:

$$[\tilde{A}_n^*] = \begin{bmatrix} 0 & -\frac{a_2}{a_1} & -\frac{a_3}{a_1} \\ -\frac{b_1}{b_2} & 0 & -\frac{b_3}{b_2} \\ -\frac{c_1}{c_3} & -\frac{c_2}{c_3} & 0 \end{bmatrix}.$$

НСГ изображен на рис. 4.26, а. Перейдем к построению матрицы  $[\tilde{A}_{nn}^*]$  для ННСГ по формуле (4.28):

$$[\tilde{A}_{nn}^*] = \begin{bmatrix} (a_1 + 1) & a_2 & a_3 \\ b_1 & (b_2 + 1) & b_3 \\ c_1 & c_2 & (c_3 + 1) \end{bmatrix}.$$

ННСГ, соответствующий матрице  $[\tilde{A}_{nn}]$ , изображен на рис. 4.26, б.

*Пример 4.10.* Построить сигнальные графы для определения различных характеристик следующих реакций:

а) реакция первого порядка с константой скорости  $k = k_0$  [мин<sup>-1</sup>] при 0°C.

Схема реакции:  $A \xrightarrow{k} 2B$ . Уравнение кинетики реакции:

$$dc_A/dt = -kc_A, \quad 1/2(dc_B/dt) = kc_A.$$

Начальные условия:  $c_A(0) = c_A^*$ ;  $c_B(0) = 0$ . Уравнения кинетики, преобразованные по Лапласу ( $s$ -комплексная переменная), имеют вид:

$$\begin{cases} c_A = -s^{-1}kc_A; \\ c_B = 2s^{-1}kc_A \end{cases}$$

По указанным уравнениям строим ННСГ, представленный на рис. 4.27.

б) для сложной реакции, протекающей при  $T = \text{const}$  в проточном реакторе:

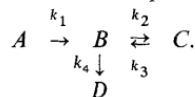
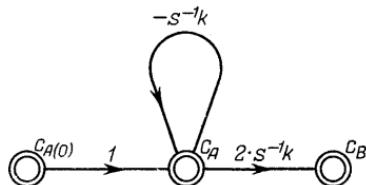


Рис. 4.27. Сигнальный граф системы уравнений кинетики химической реакции первого порядка  $A \xrightarrow{k} 2B$



Начальные концентрации реагентов:  $c_A(0) = 1$ ;  $c_B(0) = c_C(0) = c_D(0) = 0$ ; концентрации реагентов во входном потоке:  $c_{A_H} = c_{A_H}^*$  и  $c_{B_H} = c_{C_H} = c_{D_H} = 0$ ; константы скоростей:  $k_1, k_2, k_3, k_4$ ;  $\tau$  — среднее время пребывания реагента.

Система уравнений кинетики имеет вид:

$$dc_A/dt = \frac{1}{\tau}(c_{A_H} - c_A) - k_1 c_A;$$

$$dc_B/dt = -\frac{1}{\tau}c_B + k_1 c_A - (k_2 + k_4)c_B + k_3 c_C;$$

$$dc_C/dt = -(1/\tau)c_C + k_2 c_B - k_3 c_C;$$

$$dc_D/dt = -(1/\tau)c_D + k_4 c_B.$$

Переходя к преобразованию Лапласа  $d/dt \Rightarrow s$  и обозначая  $1/\tau = \Phi$ , получаем СЛУ вида:

$$c_A = s^{-1}\Phi(c_{A_H} - c_A) - s^{-1}k_1 c_A;$$

$$c_B = -s^{-1}\Phi c_B + s^{-1}k_1 c_A - s^{-1}(k_2 + k_4)c_B + s^{-1}k_3 c_C;$$

$$c_C = -s^{-1}\Phi c_C + s^{-1}k_2 c_B - s^{-1}k_3 c_C;$$

$$c_D = -s^{-1}\Phi c_D + s^{-1}k_4 c_B.$$

ННСГ для химической реакции, протекающей в проточном реакторе с мешалкой, представлена на рис. 4.28.

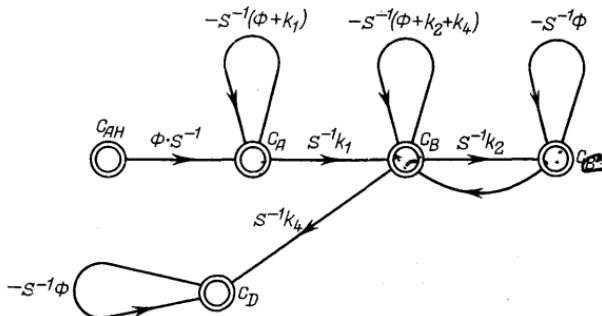


Рис. 4.28. Сигнальный граф системы уравнений кинетики химической реакции протекающей в проточном реакторе с мешалкой

## 4.7. СТРУКТУРНЫЕ ГРАФЫ ХТС

**Структурные графы (СТГ)** отображают идеальные физические и причинно-следственные взаимосвязи некоторых (в ряде случаев выделенных условно) простых идеальных гидравлических или тепловых физических компонентов, совокупность которых характеризует особенности протекания гидродинамических, тепловых или механических процессов как в отдельных элементах ХТС, так и в системе в целом.

В каждом элементе (аппарате) ХТС и ХТС в целом возможно реально или условно выделить ряд простых идеальных физических компонентов (ИФК), отображающих определенные свойства элемента:

1) компоненты, создающие потенциальную или кинетическую энергию, которые называют *компонентами-источниками*. Примерами компонентов-источников являются «идеальные» компрессоры и насосы, не обладающие потерей напора или утечкой потока; различные нагреватели и т. д.;

2) компоненты, рассеивающие энергию системы – *резистивные компоненты (сопротивления)*. Так, гидравлическими сопротивлениями являются участки трубопроводов и клапаны; кроме того, гидравлическое сопротивление характеризует потерю напора при истечении жидкости из аппарата;

3) компоненты, обладающие способностью накапливать вещество или энергию системы, а также характеризующие свойства упругости вещества – *емкостные компоненты*;

4) компоненты, характеризующие инерционный эффект массы в потоке вещества – *индуктивные компоненты*;

5) каждый ИФК имеет некоторый параметр, а его функционирование определяется некоторыми сигналами, или информационными переменными. Для исследования гидравлических и тепловых процессов любую ХТС можно представить как упорядоченную совокупность рассмотренных идеальных физических компонентов, объединенных между собой *точками связи (полюсами связи)*.

Тип компонентов, число и способ их соединения обусловливают свойства элементов и ХТС, а также определяют значение элементов матриц преобразования гидродинамических и тепловых процессов (см. раздел 3.5). Характеристики каждого ИФК некоторой ХТС, если известны его параметры, представим в виде *полюсных уравнений*, включающих два типа сигналов, или скалярных величин, которые связаны с двумя классами измерений на «полюсах» изолированного ИФК (рис. 4.29, а).

*Первый тип* скалярных величин – это сигналы, количественные значения которых могут быть измерены, по крайней мере, теоретически при помощи приборов, включаемых параллельно на «полюсы» ИФК (прибор П1 на рис. 4.29, а) без разрезания

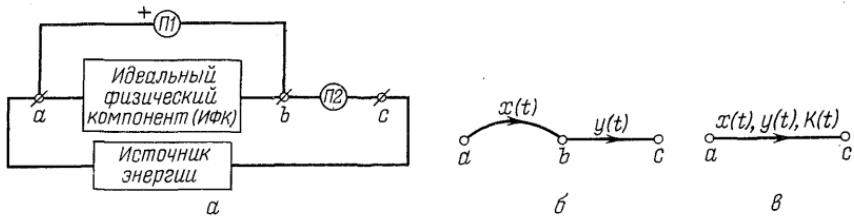


Рис. 4.29. Определение коэффициентов передачи двухполюсного системного компонента (а), линейный граф полюсных измерений для компонента (б) и полюсный график компонента (в)

системы в точках соединения ИФК (например, манометра или термопары). Такого типа сигналы назовем «параллельными» переменными, а соответствующий этим переменным класс измерений – «параллельными» измерениями.

Второй тип скалярных величин – это сигналы, количественные значения которых измеряют, последовательно включая системный компонент и измерительный прибор (прибор П2 на рис. 4.29, а) при разрезании системы в точках соединения ИФК (например, расходомера или калориметра). Этот тип сигналов назовем «последовательными переменными», а соответствующий класс измерений – «последовательными» измерениями. Каждому двухполюсному ИФК соответствует полюсное уравнение и полюсный график (рис. 4.29, б, в). В общем случае полюсное уравнение каждого ИФК с сосредоточенными параметрами имеет вид:

$$Y(s) = K(s) X(s), \quad (4.30)$$

где  $s$  – комплексная переменная преобразования Лапласа;  $K(s)$  – коэффициент передачи (комплексная проводимость), характеризующий свойства ИФК;  $Y(s)$  и  $X(s)$  – изображения по Лапласу для последовательной  $y(t)$  и параллельной  $x(t)$  переменных ИФК.

Каждому простому ИФК соответствует некоторая ветвь СТГ, называемая полюсным графиком этой ИФК. Полюсный график ИФК – взвешенный по вершинам и по дугам простой орграф, отображающий ориентацию измерений параллельных и последовательных переменных по отношению к полюсам ИФК.

При исследовании гидродинамических процессов полюсные уравнения ИФК, связанные с измерением последовательной переменной – потока вещества  $Q(t)$  и параллельной переменной – давления  $P(t)$  имеют следующий вид:

для гидродинамического сопротивления

$$P(s) = RQ(s) \text{ или } Q(s) = GP(s);$$

для гидравлической емкости

$$Q(s) = csP(s);$$

## для гидравлической индуктивности

$$P(s) = LsQ(s),$$

где  $R$  – параметр гидравлического сопротивления;  $G = 1/R$  – параметр гидравлической проводимости;  $c$  – параметр гидравлической емкости;  $cs$  – комплексная проводимость гидравлической емкости;  $L$  – параметр гидравлической индуктивности;  $Ls$  – комплексное сопротивление гидравлической индуктивности.

Полюсные уравнения для компонентов источников потока и давления имеют соответственно вид:

$$Q(s) = Q_0 \text{ и } P(s) = P_0,$$

где  $Q_0$  и  $P_0$  – известные величины.

При исследовании тепловых процессов полюсные уравнения ИФК, включающие в себя последовательную переменную – тепловой поток  $H(t)$  и параллельную переменную – температуру  $T(t)$ , имеют вид:

для теплового сопротивления

$$T(s) = rH(s) \text{ или } H(s) = gT(s);$$

для тепловой емкости

$$H(s) = csT(s);$$

для источника теплового потока

$$H(s) = H_0;$$

для источника температуры

$$T(s) = T_0,$$

где  $r$  – параметр теплового сопротивления;  $g = 1/r$  – параметр теплопроводности;  $c$  – параметр тепловой емкости;  $cs$  – комплексная проводимость тепловой емкости;  $H_0$  и  $T_0$  – известные величины.

Полюсные графы некоторых гидродинамических и тепловых ИФК представлены на рис. 4.30. Параметры гидродинамических и тепловых двухполюсных ИФК определяются параметрами элементов ХТС и физических потоков ХТС (геометрические размеры, плотности жидкостей и газов, теплопроводность и удельная теплоемкость вещества и т. п.).

Отметим, что в зависимости от целей исследования данной ХТС в общем случае ИФК может не совпадать с «простым» физическим элементом ХТС. Так, участок несжимаемого трубопровода ХТС, по которому движется упругая жидкость, можно представить как совокупность нескольких ИФК: гидравлического сопротивления, учитывающего потерю напора в трубопроводе; гидравлической емкости, учитывающей неупругость стенок трубопровода, и гидравлической индуктивности  $L$ , учитывающей эффект инерционной массы в потоке жидкости. Параметры этих ИФК определяют через параметры трубопровода и упругой жидкости.

Системы уравнений ММ и характеристики функционирования ХТС можно получить из анализа свойств СТГ. *Структурный граф* – это взвешенный по вершинам и дугам орграф, образованный совокупностью полюсных графов ИФК. *Вершины* (узлы) СТГ отображают полюса ИФК, а их вес равен узловым значениям параллельных переменных, т. е. значениям параллельных переменных, измеренным относительно базовой вершины графа. *Базовая вершина* СТГ соответствует некоторой внешней базовой точке для параллельных измерений в ХТС (атмосферное давление; абсолютный нуль температуры). *Каждой ветви*, или

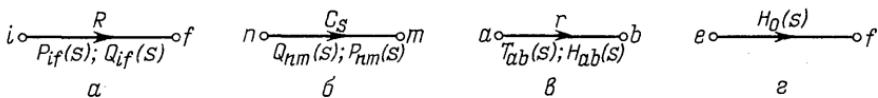


Рис. 4.30. Полюсный граф некоторых компонентов ХТС:

*a* – гидравлического сопротивления; *b* – гидравлической емкости; *v* – теплового сопротивления; *z* – источника теплового потока

полюсному графу ИФК, соответствует некоторая последовательная переменная  $y_i(t)$  и некоторая параллельная переменная  $x_j(t)$  данной простой ИФК. Величина параллельной переменной  $x_j(t)$  равна разности величин «узловых» значений параллельных переменных вершин данной ветви графа.

Каждая *i*-я вершина СТГ (исключая базовую) обладает *собственной проводимостью*, а две смежные вершины СТГ имеют *взаимную проводимость*. Собственная проводимость  $\zeta_i$  вершины *i* равна сумме комплексных проводимостей ветвей СТГ (или полюсных компонентов), расположенных между данной и базовой вершиной, когда все остальные вершины СТГ замкнуты накоротко (объединены) с базовой. *Взаимная проводимость*  $\zeta = \zeta_{ij} = \zeta_{ji}$  между двумя вершинами *i* и *j* равна сумме комплексной проводимости ветвей, расположенных между этими вершинами СТГ, когда все остальные вершины СТГ замкнуты накоротко с базовой вершиной. *Комплексная проводимость* ветви ИФК-источника параллельных переменных равна бесконечности (ветвь замкнута накоротко), а ветви ИФК-источника последовательных переменных равна нулю (разрыв ветви).

Для последовательных и параллельных переменных полюсных уравнений ИФК вида (4.30) при исследовании тепловых и гидравлических процессов в ХТС для СТГ справедливы два типа уравнений, отображающих основные свойства этих переменных: *уравнения вершин* и *уравнения циклов*. В каждой *k*-й вершине СТГ для последовательных переменных системы справедливо *уравнение вершин*

$$\sum_{j=1}^n a_{kj} y_j(t) = 0, \quad (4.31)$$

где  $y_j(t)$  – последовательная переменная, соответствующая  $j$ -й ветви графа;  $j = 1, n$  – число ветвей СТГ;  $a_{kj}$  – элемент матрицы инциденций СТГ (см. раздел 4.2).

Для каждого  $k$ -го цикла СТГ для параллельных переменных ХТС справедливо *уравнение циклов*:

$$\sum_{j=1}^n b_{kj} x_j(t) = 0, \quad (4.32)$$

где  $x_j(t)$  – параллельная переменная, соответствующая  $j$ -й ветви;  $j = 1, n$  – число ветвей;  $b_{kj}$  – элемент транспонированной матрицы циклов СТГ (см. раздел 4.2).

Уравнения вершин и циклов отображают взаимосвязь между полюсными переменными ИФК системы. Система уравнений математических моделей гидравлических или тепловых процессов ХТС представляет собой совокупность независимых уравнений вершин и циклов СТГ (4.31) и (4.32), а также полюсных уравнений ИФК (4.47).

**Пример 4.11.** Построить СТГ для исследований гидродинамических процессов ХТС (рис. 4.31, а) и определить значения собственных и взаимных проводимостей узлов СТГ.

**Решение.** На основе анализа гидравлических процессов в рассматриваемой ХТС выделяют следующие ИФК (рис. 4.31, б). I – источник потока жидкости  $Q_n$ ; II – гидравлическая емкость первого элемента  $c_1 = F_1$  ( $F_i$  – площадь поперечного сечения  $i$ -го элемента); III – гидравлическое сопротивление  $R_1$  участка трубопровода между первым и вторым элементом; IV – гидравлическая емкость второго элемента  $c_2 = F_2$ ; V – гидравлическое сопротивление  $R_2$  участка трубопровода между вторым и третьим элементом; VI – гидравлическая емкость третьего элемента  $c_3 = F_3$ ; VII – источник потока  $Q_0$ . Линеаризованные полюсные уравнения этих ИФК в матричной форме имеют вид:

$$\begin{bmatrix} Q_1(s) \\ Q_4(s) \\ Q_2(s) \\ Q_5(s) \\ Q_3(s) \\ Q_n(s) \\ Q_0(s) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} F_1 s & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & K_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & F_2 \cdot s & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & K_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & F_2 \cdot s & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} P_1(s) \\ P_4(s) \\ P_2(s) \\ P_5(s) \\ P_3(s) \\ Q_n(s) \\ Q_0(s) \end{bmatrix},$$

где  $P_i(s) = h_i(s)$  – уровень жидкости в  $i$ -ом элементе;  $K_i = 1/R_i$  – проводимость  $i$ -го трубопровода. В соответствии с соединением «полюсов» ИФК в ХТС рисуют СТГ (рис. 4.31, в), в котором узел 0 является базовым, узлы  $A$ ,  $B$  и  $C$  соответствуют давлениям в элементах. Все ветви СТГ обладают собственной проводимостью (коэффициентом передачи) согласно матричному уравнению. Взаимные и собственные проводимости узлов СТГ (рис. 4.31, в) равны:

$$\zeta_{AB} = \zeta_{BA} = K_1; \quad \zeta_{BC} = \zeta_{CB} = K_2; \quad \zeta_{AA} = K_1 + F_1 s; \quad \zeta_{BB} = K_1 + K_2 + F_2 s;$$

$$\zeta_{CC} = K_2 + F_3 s$$

**Пример 4.12.** Для исследования тепловых процессов в реакторе ХТС (рис. 4.32, а) построить СТГ и определить величины собственных и взаимных проводимостей его узлов.

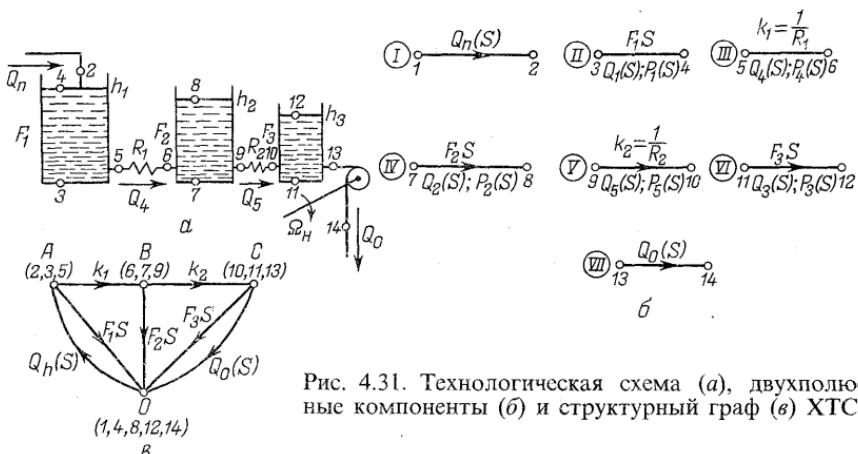


Рис. 4.31. Технологическая схема (a), двухполюсные компоненты (б) и структурный граф (в) XTC

**Решение.** При изучении тепловых процессов, происходящих в реакторе, можно выделить восемь ИФК: источник теплового потока  $H_1$ ; источник теплового потока  $H_2$ ; источник температуры  $T$  (температура внешней среды); тепловая емкость жидкости в реакторе  $c_0$ ; тепловая емкость стенок реактора  $c_m$ ; теплопроводность между стенками реактора и внешней средой  $k_{x.m}$ ; теплопроводность между жидкостью и стенками реактора  $k_{ж.m}$ ; теплосодержание  $k_0$  отводимого потока  $Q_0$ . Полюсные уравнения ИФК реактора в матричной форме имеют вид:

$$\begin{bmatrix} H_1(s) \\ H_2(s) \\ H_0(s) \\ H_5(s) \\ H_6(s) \\ H_3(s) \\ H_4(s) \\ T(s) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_0 s & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_m s & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & k_{ж.m} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & k_{x.m} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} H_1(s) \\ H_2(s) \\ T_0(s) \\ T_5(s) \\ T_m(s) \\ T_3(s) \\ T_4(s) \\ T(s) \end{bmatrix},$$

где  $T_0$  – температура отводимого потока  $Q_0$ ;  $H_1$  и  $H_2$  – тепловые потоки, вводимые в реактор потоками реагентов  $Q_1$  и  $Q_2$  с температурами  $T_1$  и  $T_2$ ;  $T_m$  – температура металлических стенок реактора.

В реакторе за счет регулирования уровня обеспечивается условие  $Q_0 = Q_1 + Q_2$ .

В СТГ реактора (рис. 4.32, б) узел 0 соответствует базовой точке измерения температуры; узел А – температуре  $T_0$ ; узел В – температуре  $T_m$ ; узел С – температуре внешней среды  $T$ . Взаимные и собственные проводимости узлов СТГ равны:

$$\begin{aligned} \zeta_{AA} &= c_0 s + k_0 + k_{ж.m}; \\ \zeta_{BB} &= k_{ж.m} + k_{x.m} + c_m s; \quad \zeta_{CC} = \infty; \\ \zeta_{AB} &= \zeta_{BA} = k_{ж.m}; \quad \zeta_{BC} = \zeta_{CB} = k_{x.m} \end{aligned}$$

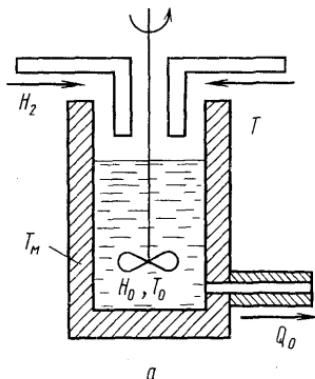
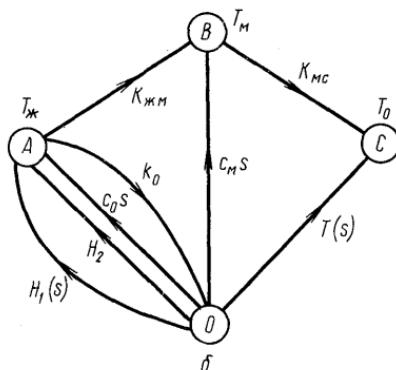


Рис. 4.32. Реактор (а) и его структурный граф (б)



#### 4.8. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

В.4-1. Сформулируйте теоретико-множественные и наглядно-графические определения понятий: граф, орграф, двудольный граф и мультиграф.

В.4-2. Назовите области науки, в которых широко применяется аппарат теории графов.

В.4-3. Назовите основные классы и группы топологических моделей (графов), используемых при математическом моделировании и анализе ХТС.

В.4-4. Сформулируйте понятия: изоморфные графы; лес; элементарный цикл; остворный подграф; кратные дуги (ребра); упорядоченный по слоям вершин граф.

В.4-5. Чем различаются подграфы некоторого исходного смешанного графа, представляющие собой путь и цепь, контур и цикл?

В.4-6. Какая взаимосвязь между понятиями дерево и сеть; подграф и остворное дерево графа?

В.4-7. Назовите виды матриц, которые применяют для отображения графов.

В.4-8. Каким образом можно определить вершины-истоки, вершины-стоки и петли графа по следующим матрицам: ветвей  $[L]$ , смежности  $[H]$  и инциденций  $[S]$ ?

В.4-9. Сформулируйте и докажите теорему о свойствах дерева и леса.

В.4-10. Сформулируйте и докажите теоремы, позволяющие определять циклы и деревья орграфа по его матрице инциденций  $[S]$ .

В.4-11. Какая взаимосвязь между понятиями фундаментальный цикл и отсечение орграфа?

В.4-12. Чему равны ранги матриц инциденций  $[S]$ , циклов  $[M]$  и отсечений  $[N]$  орграфа?

В.4-13. Сформулируйте отличия понятий МПГО и МПГК, ППГ и МПГО.

В.4-14. Запишите основные уравнения математической модели ХТС, которые отображаются МПГО, МПГК и ТПГ.

В.4-15. Какая взаимосвязь между вершинами ППГ и ИПМГ, между дугами ППГ и ИПМГ?

В.4-16. В чем различия и какая взаимосвязь между понятиями ДИГ и ИГ?

В.4-17. Объясните, как по исходному неориентированному ДИГ некоторой ХТС построить ориентированный ДИГ.

В.4-18. Какая взаимосвязь между ИГ и нормализованным СГ неоднородной СЛУ?

В.4-19. В чем различия структуры и коэффициентов передач ветвей нормализованного и ненормализованного СГ, построенных для однородной СЛУ? Запи-

шите упорядоченную форму СЛУ, соответствующую различным видам информационных сигнальных графов: ненормализованному и нормализованному СГ.

В.4-20. Расскажите методику построения СГ, который отображает однородную СЛУ.

В.4-21. Назовите основные идеальные физические компоненты гидравлических и тепловых процессов ХТС.

В.4-22. Запишите уравнения вершин и циклов для структурных графов ХТС.

3.4-1. Заданы матрицы отсечений  $[N]$  и подматрица двухстрочной матрицы  $[L_T^*]$ , соответствующая некоторому орграфу, имеющие следующий вид:

$$[N] = (\eta_1) \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_5 \\ 1 & & | & -1 & -1 & 0 \\ (\eta_2) & & 1 & | & 1 & 1 & -1 \\ (\eta_3) & & & 1 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix};$$

$$[L_T^*] = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_5 \\ 2 & 2 & 4 \\ 1 & 4 & 3 \end{bmatrix}.$$

Необходимо построить орграф, отображаемый матрицами  $[N]$  и  $[L_T^*]$ . Сколько решений имеет эта задача?

3.4-2. Задана цикломатическая матрица  $[C]$  следующего вида:

$$[C] = \begin{array}{c|ccccc} & \mu_1 & \mu_2 & \mu_3 & \mu_4 & \mu_5 \\ \hline 5 & 1 & & & & \\ 6 & & 1 & & & \\ 7 & & & 1 & & \\ 8 & & & & 1 & \\ 9 & & & & & 1 \\ \hline 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 0 & -1 & 0 & 1 & 1 \\ 4 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{array}.$$

Необходимо построить орграф, который отображается матрицей  $[C]$ . Сколько решений имеет эта задача?

3.4-3. Задана матрица отсечений  $[N]$  и подматрица матрицы инциденций  $[S_T^*]$  некоторого орграфа, имеющие следующий вид:

$$[N] = (\eta_1) \begin{bmatrix} 2 & 5 & 7 & | & 1 & 3 & 4 & 6 \\ 1 & & & | & 0 & -1 & -1 & 0 \\ (\eta_2) & & 1 & | & 0 & 0 & 1 & -1 \\ (\eta_3) & & & 1 & 1 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix};$$

$$[S_T^*] = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 7 \\ a & -1 & 0 & 0 \\ b & 0 & -1 & 1 \\ c & 1 & 1 & 0 \\ d & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Необходимо построить орграф, отображаемый матрицами  $[N]$  и  $[S_T^*]$ , составить для нарисованного орграфа матрицу  $[C]$ . Имеет ли эта задача однозначное решение?

3.4-4. Постройте графы, отображающие пространственное строение молекул бутадиена-1,3 и пропилена, вершины которых соответствуют атомам С и Н, а ребра – химическим связям. Указанного вида графы называют химическими. Сформулируйте основные свойства каждого химического графа; определите ранг графа, степени всех его вершин и цикломатическое число; составьте матрицы смежности и инциденций этих химических графов.

3.4-5. Предложите методику определения полного числа изомеров алканов на основе анализа структур соответствующих им химических графов остовых деревьев.

3.4-6. Постройте МПГО, МПГ по расходам углерода и азота, а также ТПГ для отделения химического синтеза молекул карбамида в ХТС производства карбамида.

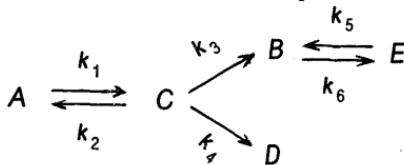
3.4-7. Постройте ППГ, МПГО, МПГ по расходам серы и водорода, а также ТПГ для контактного отделения ХТС производства серной кислоты по схеме с двойным контактированием и двойной абсорбцией.

3.4-8. Постройте МПГ по расходу азота для ХТС производства аммиака под средним давлением, технологическая схема которой изображена на рис. 1.5.

3.4-9. Постройте тепловые потоковые графы процессов растворения, кристаллизации, дросселирования и компрессирования.

3.4-10. Для одноконтурной ХТС производства 1,2-дихлорэтана (см. пример 2.7) необходимо построить ППГ, МПГО, а также МПГК по расходу химического элемента углерода.

3.4-11. Для заданной сложной химической реакции:



с начальными условиями:  $c_A(0) = c_A^*$ ;  $c_C(0) = c_C^*$ ;  $c_B(0) = c_B^*$ ;  $c_D(0) = c_E(0) = 0$  и заданными значениями  $k_i$  – констант реакций 1-го порядка необходимо составить систему кинетических уравнений, для которой построить ДИГ, ИГ, нормализованный и ненормализованный сигнальные графы.

3.4-12. Для процесса теплообмена в аппарате «труба в трубе» выделить тепловые ИФК, составить полюсные уравнения для этих ИФК и построить структурный граф.

3.4-13. Для ХТС, состоящей из двух последовательно соединенных резервуаров под давлением  $p_1$  и  $p_2$ , имеющих гидравлические емкости соответственно  $C_1$  и  $C_2$ , выделить гидравлические ИФК, составить полюсные уравнения ИФК и построить структурные графы гидродинамических процессов для установившегося и переходного режимов. Давление на входе ХТС равно  $p_0$ , а на выходе ХТС  $p_3$ ; известны гидравлические сопротивления участков трубопроводов, между входом ХТС и первым резервуаром  $R_1$ , между первым и вторым резервуаром  $R_2$ , между вторым резервуаром и выходом ХТС  $R_3$ .

# МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ АНАЛИЗА И ОПТИМИЗАЦИИ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

## Глава 5

## ТОПОЛОГИЧЕСКО-СТРУКТУРНЫЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ АНАЛИЗА ХТС

### 5.1. ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ МЕТОД СОСТАВЛЕНИЯ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ МАТЕРИАЛЬНО-ТЕПЛОВЫХ БАЛАНСОВ ХТС

Топологический метод составления СУ материально-тепловых балансов ХТС, базирующийся на анализе топологических свойств материальных и тепловых ЦПГ (см. разделы 4.4.2, 4.4.3), позволяет при расчете выбирать набор независимых свободных информационных переменных, устанавливать требуемое число УФХС (см. раздел 2.6) и записывать в явной форме значения базисных переменных как функции СВИП. Рассмотрим сущность и основные этапы метода.

Любому материальному и тепловому ЦПГ некоторой ХТС соответствует матричное уравнение вершин, составленное для потоков по дугам ЦПГ (см. раздел 4.4):

$$[S^*] \times [Q] = 0, \quad (5.1)$$

где  $[S^*]$  – матрица инциденций ЦПГ (см. раздел 4.2), имеющая размер  $(R \times e)$ ;  $[Q]$  – матрица-столбец потоков ХТС размерностью  $(e \times 1)$ .

Для ЦПГ вместо матричного уравнения вершин (5.1) можно составить эквивалентное матричное уравнение отсечений:

$$[N] \times [Q] = 0 \quad (5.2)$$

где  $[N]$  – матрица отсечений ЦПГ (см. раздел 4.2), имеющая размер  $[R \times e]$ .

Преобразуем матричное уравнение (5.2), выделив в матрице  $[Q]$  переменные потоки, соответствующие ветвям формального дерева ЦПГ  $Q_b$  и хордам ЦПГ  $Q_c$ , а также разбив матрицу  $[N]$  на подматрицы с учетом выражения (4.5):

$$[E \mid D] \times \begin{bmatrix} Q_b \\ Q_c \end{bmatrix} = 0, \quad (5.3)$$

где  $[D]$  – матрица размера  $[R \times (e - R)]$ ;  $[E]$  – единичная матрица порядка  $R$ .

Матричное уравнение отсечений ЦПГ, записанное в упорядоченной форме (5.3), приводит к выводу о том, что базисные потоки ХТС, соответствующие потокам по ветвям формального дерева ЦПГ  $Q_b$ , всегда могут быть выражены через свободные и квазисвободные потоки ХТС, отвечающие потокам по хордам ЦПГ  $Q_c$ , а именно:

$$[Q_b] = -[D] \times [Q_c]. \quad (5.4)$$

Значение квазисвободных потоков рассчитывают из уравнений физико-химических связей (УФХС), в которые входят как свободные, так и базисные переменные. Таким образом, в общем случае при составлении и расчете СУМТБ, как правило, система уравнений (5.4) должна быть дополнена системой УФХС. Выражение же  $[Q_c]$  через  $[Q_b]$  предполагает нахождение обратной матрицы  $[D]^{-1}$ , которая в общем случае может не существовать.

Для любого выбранного формального дерева ЦПГ для подматриц  $[D]$  и  $[F]$ , входящих соответственно в матрицу отсечений  $[N]$  (4.5) и матрицу фундаментальных циклов  $[C]$  (4.4), справедливо соотношение:

$$[D] = -[F]. \quad (5.5)$$

Рассмотрим произвольный подграф некоторого ЦПГ с выбранным формальным деревом (рис. 5.1). Из выражений (4.4) и (4.5), следует, что число строк, число столбцов и размеры матриц  $[D]$  и  $[F]$ , составленных для этого ЦПГ тождественно равны.

Установим соотношения между величиной элементов матриц  $[D]$  и  $[F]$ .

Для этого подграфа (см. рис. 5.1), в котором выделены отсечение  $\eta_1 = \{g_0, g_1\}$  и фундаментальный цикл  $\mu_1 = \{g_0; g_0; g_1\}$ , образованные ветвью

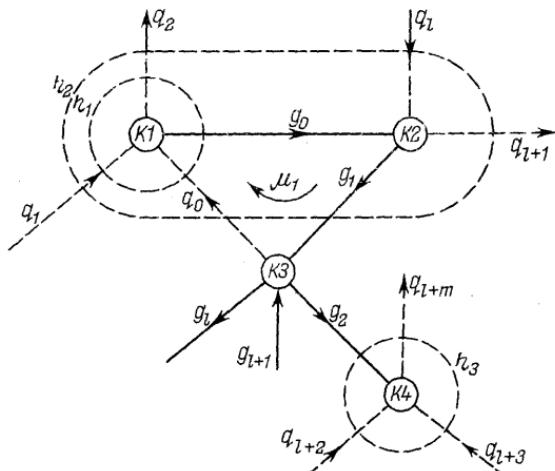


Рис. 5.1. Некоторый подграф произвольного циклического потокового графа ХТС:

$\eta_i$  —  $i$ -отсечение;  $\mu_j$  —  $j$ -й фундаментальный цикл;  $g_i$  —  $i$ -я ветвь формального дерева (сплошная линия);  $q_j$  —  $j$ -я хорда (штриховая линия)

формального дерева  $g_0$  и хордой  $q_0$ , справедливы следующие рассуждения. Если  $q$ -я хорда входит в  $\eta_1$ -е отсечение, то образующая это отсечение  $g_0$ -я ветвь формального дерева будет обязательно принадлежать  $\mu_1$ -му фундаментальному циклу, образованному хордой  $q_0$ . Вследствие этого ненулевому элементу  $d_{\eta_1 q_0}$  матрицы  $[D]$  будет соответствовать ненулевой элемент  $f_{g_0 \mu_1}$  матрицы  $[F]$ . Если ориентация  $q_0$  хорды по отношению к линии  $\eta_1$ -го отсечения противоположна ориентации  $g_0$ -й ветви, то элемент  $d_{\eta_1 q_0} = -1$ . В этом случае в  $\mu_1$ -ом фундаментальном цикле, образованном хордой  $q_0$ , ориентация  $g_0$ -й ветви формального дерева будет всегда совпадать с ориентацией  $q_0$ -ой хорды, т. е. элемент  $f_{g_0 \mu_1} = +1$ , и наоборот, при изменении ориентации  $q_0$ -ой хорды по отношению к линии  $\eta_1$ -го отсечения.

Если  $q$ -я хорда не входит в  $\eta$ -е отсечение, образованное  $g$ -ой ветвью формального дерева, то  $q$ -я хорда и  $g$ -я ветвь никогда не образуют фундаментального цикла, т. е. справедливо соотношение  $d_{\eta q} = f_{g \mu} = 0$ .

Проведенные рассуждения доказывают, что если матрицы  $[N]$  и  $[C]$  составлены для одного и того же формального дерева ЦПГ, то справедливо следующее соотношение:  $[D] = -[F]$ .

Например, для ЦПГ (см. рис. 4.12, а) при формальном дереве  $T$  (см. рис. 4.12, б) матрицы  $[D]$  и  $[F]$  равны:

$$[D] = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 0 \\ +1 & +1 & -1 \\ +1 & 0 & -1 \end{bmatrix}; \quad [F] = \begin{bmatrix} +1 & +1 & 0 \\ -1 & -1 & +1 \\ -1 & 0 & +1 \end{bmatrix},$$

т. е. соотношение (5.5) выполняется.

Учитывая выражение (5.5), соотношение (5.4) можно записать в виде:

$$Q_b = [F] \times [Q_c] \quad (5.6)$$

Циклическими потоками XTC называют потоки  $Q_\mu$ , величина и направление которых совпадают с величиной и направлением потоков в хордах ЦПГ  $-Q_c$ , т. е.  $Q_c = Q_\mu$ . Таким образом, из уравнения (5.6) базисные переменные потоки XTC  $Q_b$  определяются как алгебраическая сумма циклических потоков XTC  $Q_c$ . Матричное уравнение (5.6) является основой топологического метода составления систем уравнений МТБ.

Например, для ЦПГ (см. рис. 4.12, а) соотношения между базисными переменными потоками XTC  $Q_b = (q_1, q_2, q_5)$ , свободными и квазивозободными переменными потоками  $Q_c = (q_3, q_4, q_6)$  в соответствии с (5.6) имеют вид:

$$\begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} +1 & +1 & 0 \\ -1 & -1 & +1 \\ -1 & 0 & +1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} q_3 \\ q_4 \\ q_6 \end{bmatrix}.$$

На основе соотношения (5.6) топологический метод составления СУ балансов одного типа материальных и тепловых потоков сложной XTC состоит из следующих этапов:

1) построение в соответствии с методикой, изложенной в разделе 4.4, потокового графа для одного типа материальных (общие или компонентные расходы веществ) и тепловых потоков ХТС. В данном МПГ или ТПГ обозначают в порядке возрастания номеров наименования дуг  $w_i$  и наименования вершин  $a_i$ . Определяют общее число вершин  $v = m + n + k$  ( $m$  – число вершин-истоков,  $n$  – число вершин-стоков,  $k$  – число промежуточных вершин ПГ) и общее число дуг  $b$  потокового графа ХТС;

2) построение соответствующих материального и теплового ЦПГ, содержащего число вершин  $V = v - (m + n) + 1 = k + 1$ , число дуг  $e = b$  и имеющего ранг  $R = k$ ;

3) выбор в соответствующем ЦПГ для анализа формального дерева, содержащего число ветвей  $e_T = R$ . Дерево необходимо выбрать таким образом, чтобы потоки, отвечающие проектным переменным ХТС, а также потоки, заданные по ТУ или известные из экспериментальных исследований и из проектно-эксплуатационной документации, всегда входили бы в совокупность  $(e - R)$  дуг, являющихся хордами ЦПГ. Потоки в ветвях дерева графа  $Q_b$  являются базисными потоками ХТС. Потоки в хордах графа  $Q_c$  представляют собой либо известные свободные потоки, либо в общем случае *квазисвободные* потоки ХТС. Значения квазисвободных потоков неизвестны. Для их расчета дополнительно составляются УФХС;

4) определение значений квазисвободных потоков на основе решения либо УФХС (2.57), отражающих физико-химическую сущность ХТП при заданных проектных переменных и ТУ, либо ММ отдельных элементов ХТС, представленных в форме матриц преобразования (3.39). Решение УФХС для квазисвободных переменных потоков ХТС получают либо в виде некоторых постоянных величин, либо в виде функциональных зависимостей;

5) образование фундаментальных циклов в ЦПГ путем подключения к формальному дереву ЦПГ в порядке возрастания номеров хорд графа. Направление циклического потока в каждом фундаментальном цикле ЦПГ выбирать совпадающим с направлением потока в хорде;

6) составление для ЦПГ подматрицы  $[F]$  цикломатической матрицы  $[C]$ . Записать уравнение балансов одного типа материальных и тепловых потоков ХТС в виде соотношения между базисными и свободными потоками (5.6).

Задачи расчета балансов одного типа материальных (по общим массовым расходам или покомпонентным расходам вещества) и тепловых потоков сложных ХТС при известных величинах регламентированных входных и выходных потоков ХТС можно разделить на две группы: задачи поверочного и проектного анализа (см. разд. 2.4). К первой группе относят задачи, для которых значения коэффициентов разделения технологического потока (кртп) или коэффициентов функциональных

связей, входящих в информационные операторы элементов, представляют собой регламентированные переменные, а расчетными переменными являются некоторая часть или все внутренние потоки вещества и теплоты ХТС.

~~Ко второй группе~~ принадлежат задачи проектного анализа, для которых расчетными переменными являются кртп или коэффициенты функциональных связей и некоторая часть или все внутренние потоки ХТС.

На основе ~~рассмотренного топологического метода~~ представления СУ балансов одного типа потоков ХТС при решении задач ~~первой группы~~ получают ациклический или оптимальный циклический ИГ системы уравнений. При решении задач второй группы необходимо составить дополнительные УФХС, которые устанавливают соотношения между неизвестными коэффициентами функциональных связей или кртп, заданными величинами регламентированных потоков и внутренними потоками ХТС в зависимости от типа и параметров элементов системы. После этого выполняют следующие операции:

1) строят, используя рассмотренный топологический метод расчета балансов одного типа потоков ХТС, ациклический или оптимальный циклический ИГ системы уравнений;

2) задаются ориентировочными значениями неизвестных коэффициентов функциональных связей или кртп для элементов ХТС, каждое из которых не может быть больше 1, и рассчитывают значения базисных потоков ХТС;

3) определяют по УФХС и математическим моделям элементов с использованием численных методов для рассчитанных в п. 2 значений базисных потоков новые значения величин коэффициентов функциональных связей или кртп;

4) повторяют операции п. 2 и п. 3, пока заданные в п. 2 и новые рассчитанные в п. 3 значения коэффициентов, входящих в информационные операторы элементов ХТС, не совпадут с необходимой точностью.

Для расчета материальных и тепловых балансов ХТС в целом изложенный топологический метод применяют к каждому типу МПГ (МПГО и МПГК) и к ТПГ с учетом взаимосвязей между квазивозможными потоками соответствующих ЦПГ. Если УФХС для всех материальных и теплового ЦПГ образуют совместно разомкнутую СУ (см. раздел 3.2), то получают ациклический ИГ системы уравнений балансов ХТС. Когда уравнения физико-химических связей этих ЦПГ образуют совместно замкнутую систему уравнений, получают циклический ИГ системы уравнений балансов ХТС. При решении задач расчета балансов ХТС, для которых справедливы условия линеаризации систем уравнений материальных и тепловых балансов, топологический метод позволяет разработать ациклический ИГ системы уравнений балансов ХТС.

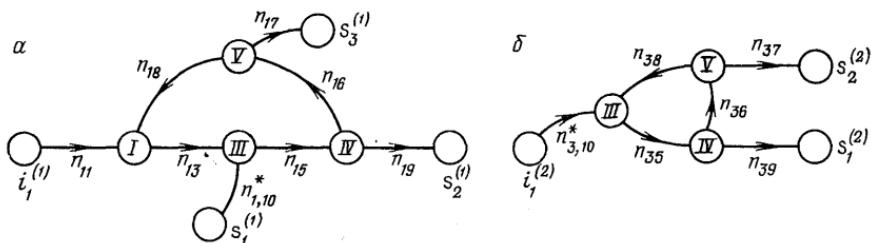


Рис. 5.2. Материальные потоковые графы по расходам хлора (а) и 1,2-дихлорэтана (б): номера вершин соответствуют номерам технологических операторов (см. рис. 2.12);  $n^*$  – фиктивные потоки

Рассмотренный метод позволяет автоматизировать процедуры самого составления и определения оптимальной стратегии решения СУ балансов при помощи ЭВМ на стадии проектирования и эксплуатации ХТС. Наряду с этим, метод дает возможность определять точки оптимального размещения контрольно-измерительных приборов для измерения параметров технологических потоков ХТС и непрерывно получать информацию о неизмеряемых параметрах ТП системы.

Пример 5.1. Для одноконтурной ХТС производства 1,2-дихлорэтана (см. рис. 2.12) в соответствии с условиями примера 2.7 составить с применением топологического метода систему уравнений балансов по расходам хлора и 1,2-дихлорэтана.

*Решение.* В соответствии с условиями примера 2.7 построены материальные потоковые графы по расходам хлора и 1,2-дихлорэтана (рис. 5.2) и циклические МПГК (рис. 5.3).

Для циклического МПГК по расходу хлора (см. рис. 5.3, а) при построении формального дерева ( $v_T = v = 5$ ;  $e_T = v_T - 1 = 4$ ) в соответствии с условиями примера 2.7 в качестве хорд ( $e_{ST} = e - e_T = 8 - 4 = 4$ ) необходимо выбрать: ветвь  $n_{11}$  – регламентированная ИП (см. уравнение  $f_{16}$  в примере 2.7); три ветви, являющиеся квазисвободными ИП:  $n_{1,10}^*, n_{16}$  и  $n_{17}$ , значения которых определяют из УФХС, соответственно  $f_{29}$ ,  $f_{23}$  и  $f_{26}$  (см. пример 2.7). Для выбранного формального дерева циклического МПГ (см. рис. 5.3, а –  $\{n_{13}, n_{15}, n_{18}, n_{19}\}$ )

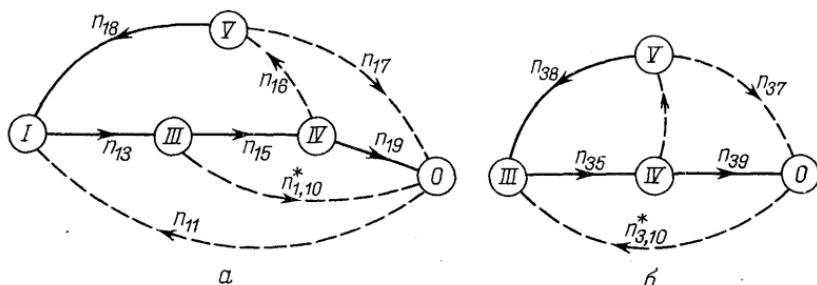


Рис. 5.3. Циклические материальные потоковые графы по расходам хлора (а) и 1,2-дихлорэтана (б), сплошные дуги – ветви дерева графа; штриховые дуги – хорды

матричное уравнение баланса по хлору (5.6) имеет вид:

$$\begin{bmatrix} n_{13} \\ n_{15} \\ n_{18} \\ n_{19} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} n_{11} \\ n_{10}^* \\ n_{16} \\ n_{17} \end{bmatrix}.$$

Для циклического МПГК по расходу 1,2-дихлорэтана (см. рис. 5.3, б) при построении формального дерева ( $v_T = v = 4$ ,  $e_T = v_T - 1 = 3$ ) в соответствии с условиями примера 2.7 в качестве хорд необходимо выбрать ( $e_{ST} = e - R = 6 - 3 = 3$ ): три квазиводные информационные переменные  $n_{3,10}^*$ ,  $n_{36}$ ,  $n_{37}$ , для определения значений которых можно использовать УФХС:  $f_{30}$ ,  $f_{25}$  и  $f_{28}$  (см. пример 2.7). Для формального дерева циклического МПГ (см. рис. 5.3, б –  $\{n_{35}, n_{38}, n_{39}\}$ ) матричное уравнение баланса по расходу 1,2-дихлорэтана (5.6) имеет вид:

$$\begin{bmatrix} n_{35} \\ n_{38} \\ n_{39} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} n_{3,10}^* \\ n_{36} \\ n_{37} \end{bmatrix}.$$



Пример 5.2. С использованием топологического метода составить СУ балансов ХТС необходимо осуществить проектный расчет материально-тепловых нагрузок элементов ХТС двухпоточной моноэтаноламиновой очистки (МЭАО) синтез-газа от диоксида углерода в производстве аммиака. В ХТС (рис. 5.4) конвертированный синтез-газ (поток  $G_1$  поступает в абсорбер 1), орошающий 15–20%-ным раствором МЭА (поток  $L_9$ ). В абсорбере происходит поглощение  $\text{CO}_2$  раствором моноэтаноламина (МЭА), а концентрация  $\text{CO}_2$  в очищенном газе (поток  $G_2$ ) снижается с 18–20 до 1,0–3,0% (об.). Насыщенный водный раствор МЭА (поток  $L_3$ ) подается центробежным насосом 2 через теплообменник 4 в регенератор (десорбер) 6 двумя потоками ( $L_5$  и  $L_6$ ), нагретыми до разных температур (поток  $L_6$  поступает в регенератор 6 через теплообменник 5). Регенератор 6 имеет выносной кипятильник 7, в который подается глухой пар (поток  $q_n$ ). Регенерированный раствор (поток  $L_9$ ) проходит межтрубное пространство ТА 5 и 4, затем насосом 3 подается в кожухотрубный холодильник 10, где охлаждается водой (поток  $q_1$ ) и поступает на орошение абсорбера. Парогазовая смесь (поток  $G_{10}$ ), выходящая из регенератора 6, поступает в конденсатор 8, где водяные пары конденсируются, а газ охлаждается. В сборнике флегмы 9 происходит отделение  $\text{CO}_2$  (поток  $G_{12}$ ) от воды (поток  $L_{11}$ ), которая поступает в узел смешения  $C_1$ , чтобы предотвратить постепенное увеличение концентрации раствора МЭА, выходящего из абсорбера 1 (поток  $L_3$ ).

Рассматриваемая ХТС является наиболее экономичной по энергетическим затратам технологической схемой МЭАО. ХТС состоит из восьми аппаратов, взаимосвязанных между собой последовательными, параллельными, перекрестными и обратными потоками. Для проектируемой ХТС заданы следующие технические условия (ТУ). Необходимо очистить  $V_n \text{ м}^3/\text{ч}$  (здесь и далее объем газа приведен к нормальным условиям) конвертированного синтез-газа, содержащего  $y_1 \%$  (об.)  $\text{CO}_2$ . Синтез-газ поступает в абсорбер, работающий при атмосферном давлении с температурой  $t_1$ ,  $^{\circ}\text{C}$ . Очищенный синтез-газ, содержащий  $y_2 \%$  (об.)  $\text{CO}_2$ , должен находиться при атмосферном давлении и иметь температуру  $t_2$ ,  $^{\circ}\text{C}$ : давление (здесь и далее абсолютное). В абсорбере давление равно  $p_a$  (Па), давление вверху регенератора  $p_p$ , температура  $\text{CO}_2$  после конденсации парогазовой смеси  $t_{19}$ ,  $^{\circ}\text{C}$ .

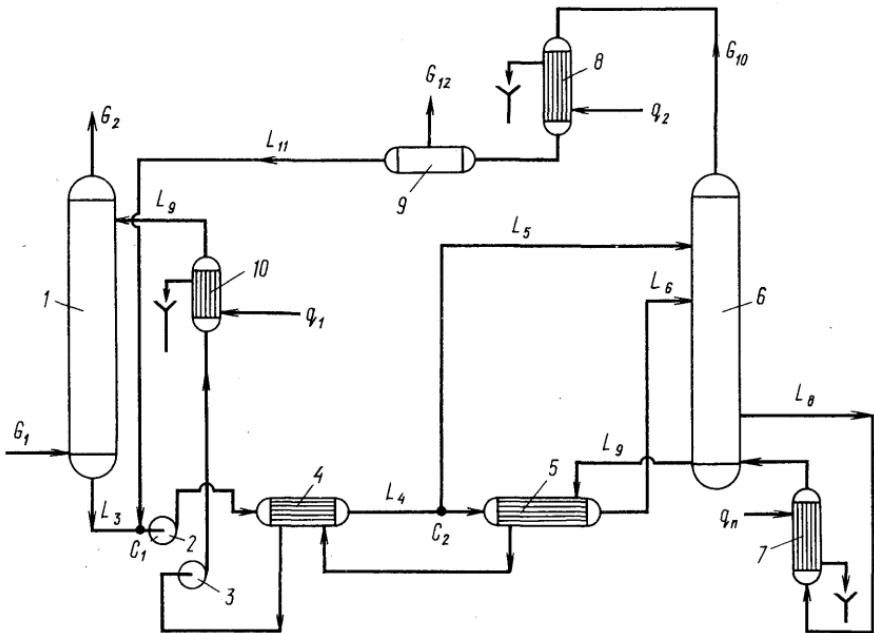


Рис. 5.4. Технологическая схема XTC моноэтаноламиновой очистки синтез-газа:

1—абсорбер; 2, 3—насосы; 4, 5—выносные теплообменники; 6—регенератор; 7—выносной кипятильник; 8—конденсатор; 9—сборник флегмы; 10—кофухотрубчатый холодильник;  $C_1$ —узел смешения;  $C_2$ —узел разделения;  $L_i$ —потоки жидкости;  $G_j$ —потоки газов;  $q_1$ ,  $q_2$ —охлаждающая вода;  $q_n$ —сухой пар

**Решение.** Вначале определим покомпонентный состав физических потоков газа и жидкости (номера потоков указаны на технологической схеме (рис. 5.4)):

$$G_1 = G_{m1-1} = G_{m1-1}^{\text{ир}} + G_{m1-1}^{\text{yr}} \quad (1)$$

$$G_2 = G_{1-n1} = G_{1-n1}^{\text{ир}} + G_{1-n1}^{\text{yr}}; \quad (2)$$

$$L_3 = L_{1-2} = L_{1-2}^{\text{в}} + G_{1-2}^{\text{yr}} + L_{1-2}^{\text{м}}; \quad (3)$$

$$L_4 = L_{2-3} = L_{2-3}^{\text{в}} + G_{2-3}^{\text{yr}} + L_{2-3}^{\text{м}}; \quad (4)$$

$$L_5 = L_{3-4} = L_{3-4}^{\text{в}} + G_{3-4}^{\text{yr}} + L_{3-4}^{\text{м}}; \quad (5)$$

$$L_6 = L_{(3-4)} = L_{(3-4)}^{\text{в}} + G_{(3-4)}^{\text{yr}} + L_{(3-4)}^{\text{м}}; \quad (6)$$

$$L_9 = L_{4-1} = L_{4-1}^{\text{в}} + G_{4-1}^{\text{yr}} + L_{4-1}^{\text{м}}; \quad (7)$$

$$L_{11} = L_{5-2} = L_{5-2}^{\text{в}} \quad (8)$$

$$G_{10} = L_{4-5} = L_{4-5}^{\text{в}} + G_{4-5}^{\text{yr}}; \quad (9)$$

$$G_{12} = G_{5-n2} = G_{5-n2}^{\text{yr}}, \quad (10)$$

где нижние двойные индексы ( $L_{i-j}$ ,  $G_{i-j}$ ) равны номерам вершин соответствующих ПГ, которым инцидентна дуга, отображающая поток жидкости ( $L$ ) или газа ( $G$ ):  $i(j)$ —выходная (входная) вершина дуги; верхние индексы: «в» соответствует массовому расходу воды, «иг»—инертного газа, «уг»— $\text{CO}_2$  и «м»—МЭА в физическом потоке.

Далее в соответствии с разработанной методикой (см. раздел 4.4), пользуясь табл. 5.1 и 5.2, строят МПГ по общим массовым расходам физических потоков (рис. 5.5, а) и по массовым расходам компонентов инертного газа (рис. 5.5, б),

Таблица 5.1. Соответствие элементов XTC вершинам потоковых графов

Элементы технологической схемы XTC (см. рис. 5.4)	Вершины потоковых графов XTC	
	материальных	теплового
Абсорбер 1	A1	B1
Узел смешения C1	A2	B2
Теплообменник 4	—	B3
Узел разделения C2	A3	B4
Теплообменник 5	—	B5
Регенератор 6 и кипятильник 7	A4	B6
Холодильник 10	—	B7
Конденсатор 8	—	B8
Сборник флегмы 9	A5	B9
Насосы 2 и 3	—	—
Истоки: конвертированный синтез-газ охлаждающая вода греющий пар	m1 — —	m1 m2, m4 m3
Стоки: очищенный синтез-газ охлаждающая вода греющий пар диоксид углерода	n1 — — n2	n1 n3, n5 n4 n2

воды (рис. 5.5, в), МЭА (рис. 5.5, г) и CO<sub>2</sub> (рис. 5.5, д), а также тепловой потоковый граф (рис. 5.6, а).

Затем строят соответствующие ЦПГ (рис. 5.7, 5.8 и 5.6, б). Необходимо отметить, что ЦПГ по массовым расходам воды и МЭА совпадают с их МПГК, изображенными на рис. 5.5, в и рис. 5.5, г.

Таблица 5.2. Соответствие физических потоков XTC дугам потоковых графов

Физические потоки (см. рис. 5.4)	Обозначение по- тока в техноло- гической схеме	Дуги потокового графа	
		материального по общим массовым рас- ходам физических потоков	теплового
Конвертированный синтез-газ	G <sub>1</sub>	G <sub>m1 - 1</sub>	H <sub>1</sub>
Очищенный синтез-газ	G <sub>2</sub>	G <sub>1 - n1</sub>	H <sub>2</sub>
Насыщенный водный раствор МЭА	L <sub>3</sub> L <sub>4</sub> L <sub>5</sub> L <sub>6</sub>	L <sub>1 - 2</sub> L <sub>2 - 3</sub> L <sub>3 - 4</sub> L <sub>3 - 4</sub>	H <sub>3</sub> H <sub>4, H<sub>5</sub></sub> H <sub>7</sub> H <sub>6, H<sub>8</sub></sub>
Регенерированный раствор МЭА	L <sub>9</sub>	L <sub>4 - 1</sub>	H <sub>13 - H<sub>16</sub></sub>
Охлаждающая вода	q <sub>1</sub> , q <sub>2</sub>	—	H <sub>17, H<sub>18</sub></sub> H <sub>20, H<sub>21</sub></sub>
Вода из сборника флегмы	L <sub>11</sub>	L <sub>5 - 2</sub>	H <sub>12</sub>
Диоксид углерода	G <sub>12</sub>	G <sub>5 - n2</sub>	H <sub>19</sub>
Парогазовая смесь	G <sub>10</sub>	G <sub>4 - 5</sub> (L <sub>4 - 5</sub> )	H <sub>10, H<sub>11</sub></sub>
Тепловой поток пара, поступающего в регенератор	q <sub>п</sub>	—	H <sub>9</sub>
Фиктивный тепловой поток, соотве- тствующий химическим превращениям	Q <sub>1</sub> Q <sub>2</sub>	—	Q <sub>1</sub> Q <sub>2</sub>
Теплота конденсации паров (фиктив- ный поток)	H <sub>22</sub> <sup>*</sup>	—	H <sub>22</sub> <sup>*</sup>

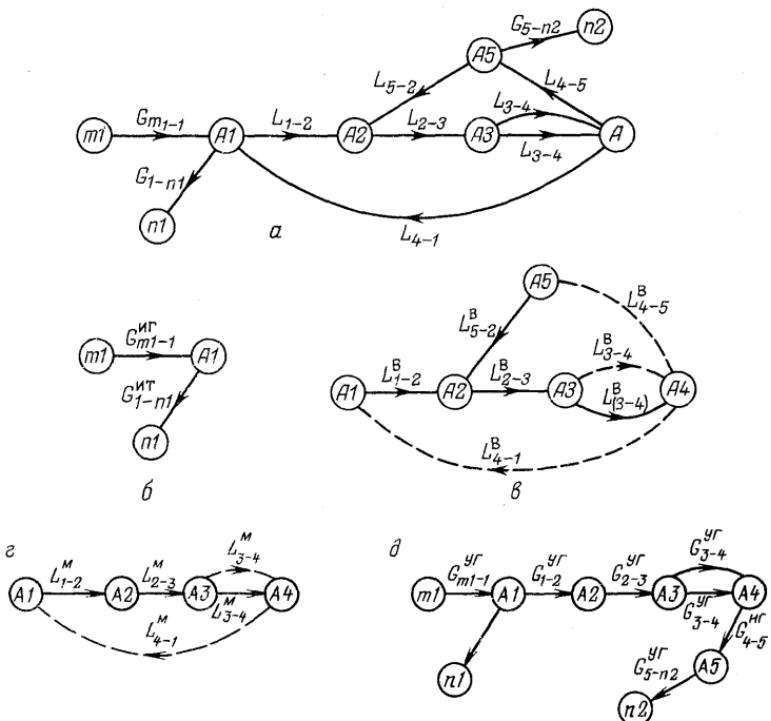


Рис. 5.5. Материальные потоковые графы ХТС по общим массовым расходам технологических потоков (а), по массовым расходам инертного газа (б), воды (с), моноэтаноламина (д)

Для каждого циклического МПГК (рис. 5.8), исходя из ТУ и физико-химической сущности хемосорбционного процесса поглощения  $\text{CO}_2$  водным раствором МЭА с учетом характеристик ЦПГ, выбирают информационные переменные ХТС (табл. 5.3), соответствующие потокам по хордам ЦПГ (изображены штриховыми линиями), и определяют их значения из УФХС.

**Баланс по инертному газу.** Свободной переменной  $G_{m1-1}^{\text{ир}}$  соответствует хорда ЦПГ (рис. 5.8, а), численное значение которой равно

$$G_{m1-1}^{\text{ир}} = V_n \rho - V_n y_1 \rho_0, \quad (11)$$

где  $\rho$  и  $\rho_0$  – плотность конвертированного синтез-газа и  $\text{CO}_2$  при нормальных условиях. Базисная переменная равна

$$G_{1-n1}^{\text{ир}} = G_{m1-1}^{\text{ир}}. \quad (12)$$

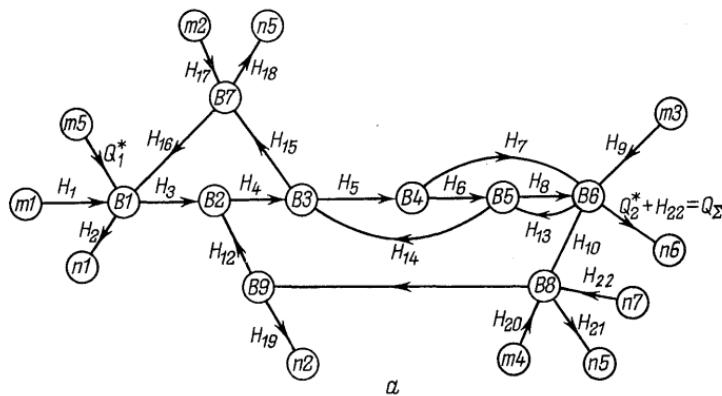
**Баланс по диоксиду углерода.** Свободные переменные, соответствующие хордам ЦПГ (рис. 5.8, б), можно записать в виде:

$$G_{m1-1}^{\text{ир}} = V_n y_1 \rho_0; \quad (13)$$

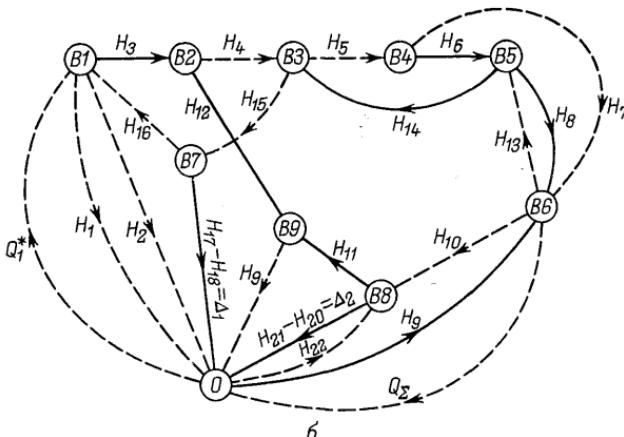
$$G_{1-n1}^{\text{ир}} = [V_n (1 - y_1) y_2 / (1 - y_2)] \rho_0; \quad (14)$$

$$G_{4-1}^{\text{ир}} = L^M \bar{x}_9, \quad (15)$$

где  $L^M$  – массовый расход МЭА в системе;  $\bar{x}$  – относительная массовая концентрация  $\text{CO}_2$  в регенерированном растворе ( $\text{kg CO}_2/\text{kg}$  МЭА).



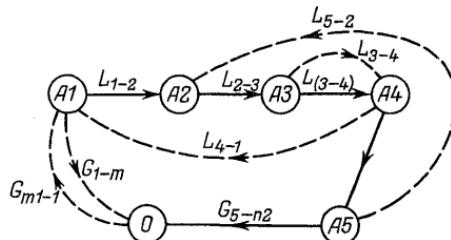
а



б

Рис. 5.6. Тепловой потоковый граф (а) и циклический тепловой потоковый граф (б) ХТС

Рис. 5.7. Циклический материальный потоковый граф по общим массовым расходам физических потоков



Величину  $\bar{x}_9$  – относительной мольной концентрации  $\text{CO}_2$  в регенерированном растворе (или степень карбонизации растворов) – выбирают, исходя из условий оптимального режима работы регенератора, а величину  $\bar{x}_3$  – относительной мольной концентрации  $\text{CO}_2$  в насыщенном растворе, – исходя из стехиометрии химической реакции образования МЭА–карбоната с учетом коррозии аппаратуры (из опыта эксплуатации промышленных систем очистки газов). Решая уравнение потоков для вершины  $A1$  ЦПГ по расходу  $\text{CO}_2$  (рис. 5.8, а), определяют массовый расход МЭА:

$$L^M = \Delta G / (\bar{x}_3 - \bar{x}_9) = M_m (G_{m1-1}^{yr} - G_{1-n1}^{yr}) / M_{yr} (\bar{x}_3 - \bar{x}_9), \quad (16)$$

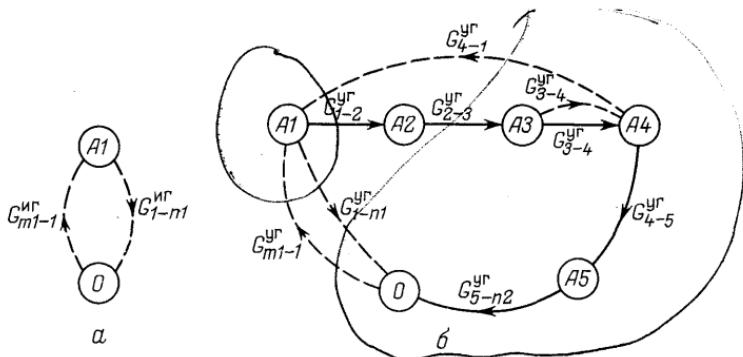


Рис. 5.8. Циклический материальный потоковый граф по массовым расходам химических компонентов – инертному газу (а) и диоксиду углерода (б)

где  $M_m$  и  $M_{yr}$  – молекулярные массы МЭА и диоксида углерода;

$$G^r_{3-4} = \gamma G^r_{2-3}; \quad (17)$$

$\gamma = L_5/(L_5 + L_6)$  – коэффициент соотношения потоков. Отметим, что величины  $\bar{x}_3$ ,  $\bar{x}_9$ ,  $L^*$  и  $\gamma$  являются проектными переменными ХТС.

Цикломатическая матрица для ЦПГ (рис. 5.8, а) имеет вид:

$$[C] = \begin{bmatrix} \bar{\mu}_1 & \bar{\mu}_2 & \bar{\mu}_3 & \bar{\mu}_4 \\ G^r_{m1-1} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ G^r_{1-n1} & 0 & 1 & 0 & 0 \\ G^r_{3-4} & 0 & 0 & 1 & 0 \\ G^r_{4-1} & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \hline G^r_{1-2} & 1 & 1 & 0 & 1 \\ G^r_{2-3} & 1 & -1 & 0 & 1 \\ G^r_{(3-4)} & 1 & -1 & -1 & 1 \\ G^r_{4-5} & 1 & -1 & 0 & 0 \\ G^r_{5-n2} & 1 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (18)$$

Величину базисных переменных потоков по соотношению (5.6) в соответствии с (18) определяют из уравнений:

$$G^r_{1-2} = G^r_{m1-1} - G^r_{1-n1} + G^r_{4-1} = L^* \bar{x}_3; \quad (19)$$

$$G^r_{2-3} = G^r_{1-2} = L^* \bar{x}_3 (M_{yr}/M_m); \quad (20)$$

Таблица 5.3. Характеристики циклических потоковых графов

Циклический потоковый график	Число вершин	Число дуг	Число хорд
По массовым расходам компонентов:			
инертный газ	2	2	1
диоксид углерода	6	9	4
МЭА	4	5	2
вода	5	7	3
По общим массовым расходам физических потоков	6	10	5
По тепловым потокам	10	22	13

$$G_{(3-4)}^{\text{yr}} = G_{m2}^{\text{yr}} - G_{2-n1}^{\text{yr}} - G_{3-4}^{\text{yr}} + G_{4-1}^{\text{yr}} = (1 - \gamma) L^{\text{M}} \bar{x}_3; \quad (21)$$

$$G_{4-5}^{\text{yr}} = G_{5-n2}^{\text{yr}} = G_{m1-1}^{\text{yr}} - G_{1-n1}^{\text{yr}} = \Delta G. \quad (22)$$

*Баланс по МЭА.* Свободные переменные соответствуют хордам ЦПГ (см. рис. 5.5, 2) и имеют численные значения:

$$L_{4-1}^{\text{M}} = L^{\text{M}}; \quad (23)$$

$$L_{3-4}^{\text{M}} = \gamma L_{2-3}^{\text{M}} = \gamma L^{\text{M}} \quad (24)$$

Базисные переменные равны:

$$L_{1-2}^{\text{M}} = L_{2-3}^{\text{M}} = L_{4-1}^{\text{M}} = L^{\text{M}}; \quad (25)$$

$$L_{(3-4)}^{\text{M}} = (1 - \gamma) L^{\text{M}}. \quad (26)$$

*Баланс по воде:* определяем величину свободных переменных, которые соответствуют хордам ЦПГ (см. рис. 5.5, 6):

$$L_{4-1}^{\text{B}} = (1 - \bar{x}_{\text{M}}) L^{\text{M}} / \bar{x}_{\text{M}}, \quad (27)$$

где  $\bar{x}_{\text{M}}$  – массовая концентрация МЭА в водном растворе (проектная переменная XTC):

$$L_{3-4}^{\text{B}} = \gamma L_{2-3}^{\text{B}}; \quad (28)$$

$$L_{4-5}^{\text{B}} = y(M_{\text{B}}/M_{\text{yr}}) \Delta G = \bar{y} \Delta G, \quad (29)$$

где  $y$  и  $\bar{y}$  – относительная мольная и массовая концентрации паров воды в парогазовой смеси,  $\Delta G$  – массовый расход диоксида углерода, извлекаемого из насыщенного раствора МЭА:

$$y = p_{\text{B}} / (p_{\text{p}} - p_{\text{B}}) = p_{\text{B}} / p_{\text{yr}}^* = n_{\text{B}} / n_{\text{yr}}, \quad (30)$$

где  $p_{\text{p}}$  – общее давление вверху регенератора;  $p_{\text{B}}$  и  $p_{\text{yr}}^*$  – парциальное давление водяного пара (диоксида углерода) над раствором МЭА при равновесии;  $n_{\text{B}} (n_{\text{yr}})$  – число кмолов водяного пара (диоксида углерода) в парогазовой смеси.

Величину  $p_{\text{yr}}^*$  и  $p_{\text{B}}$  определяют по следующим уравнениям:

$$p_{\text{yr}}^* = We^{-\frac{m}{T}} (e^{ax} - 1); \quad (31)$$

$$p_{\text{B}} = z(N) e^{-\frac{4961}{T}}, \quad (32)$$

где величины  $W(N)$ ,  $m(N)$ ,  $a(N)$  и  $z(N)$  рассчитывают из эмпирических уравнений;  $N$  – нормальность раствора МЭА;  $x$  – степень карбонизации;  $T = T_0 + t_{10}$  – температура верха регенератора; ( $t_{10}$  – проектная переменная XTC).

Составляя цикломатическую матрицу графа (рис. 5.5, 6), получаем уравнения для определения величины базисных переменных потоков:

$$L_{1-2}^{\text{B}} = L_{4-1}^{\text{B}} = (1 - \bar{x}_{\text{M}}) (L / \bar{x}_{\text{M}}); \quad (33)$$

$$L_{3-4}^{\text{B}} = L_{4-1}^{\text{B}} - L_{3-4}^{\text{M}} + L_{4-5}^{\text{B}} = (1 - \gamma) L_{2-3}^{\text{B}}; \quad (34)$$

$$L_{2-3}^B = L_{4-5}^B + L_{4-1}^B = y \Delta G - (1 - \bar{x}_M) (L_M / \bar{x}_M); \quad (35)$$

$$L_{5-2}^B = L_{4-5}^B = \bar{y} \Delta G. \quad (36)$$

Зная массовые расходы химических компонентов, по уравнениям (1)–(10) определяют массовые расходы физических потоков, т.е. материальные нагрузки на элементы ХТС.

Полученный при помощи топологического метода ациклический алгоритм стратегии расчета материальных нагрузок ХТС представляют в виде ациклического ИГ (рис. 5.9). Вершины этого ИГ соответствуют номерам уравнений.

Составление уравнений теплового баланса ХТС начинают с рассмотрения теплового ЦПГ (см. рис. 5.6, б). Для каждой дуги теплового ЦПГ справедливо соотношение:

$$H_j = L_j c_j t_j, \quad (37)$$

где  $H_j$  – тепловой поток (расход тепла);  $L_j$  – массовый расход;  $c_j$  – теплоемкость;  $t_j$  – температура  $j$ -го физического потока ХТС. При расчете тепловых нагрузок на элементы проектными переменным ХТС являются следующие величины:  $t_{13} < t^*$  – температура осмоляния раствора МЭА;  $\Delta t = t_{17} - t_{18} = t_{20} - t_{21}$  определяется оптимальными геометрическими размерами ТА и условиями эксплуатации системы;  $t_4; t_5; t_7; t_{15}; t_{16}$  – обеспечивают нормальный технологический режим очистки;  $p_n$  и  $t_n$  – давление (температура) греющего пара в соответствии с ТУ.

Определяют величины свободных тепловых потоков, являющихся хордами ЦПГ (см. рис. 5.6, б)

$$Q_1^* = Q_2^* = \Delta G \Delta H, \quad (38)$$

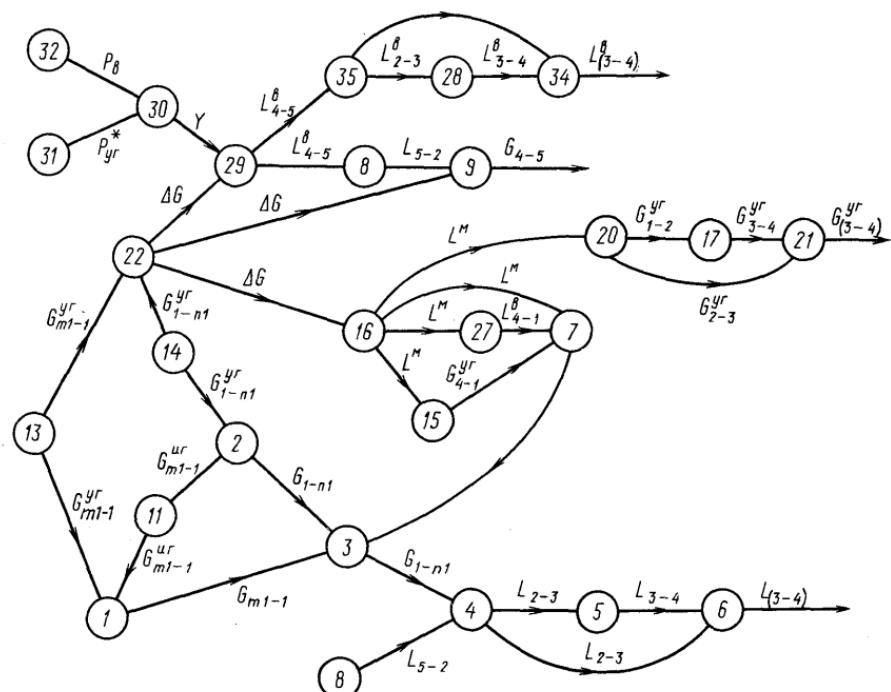


Рис. 5.9. Ациклический информационный граф системы уравнений материально-го баланса ХТС

где  $\Delta H$  – удельная интегральная теплота химической реакции;

$$H_{22} = L_{4-5}^B r; \quad (39)$$

$r$  – теплота конденсации паров воды.

Удельная теплоемкость водного раствора МЭА немного ниже теплоемкости воды и равна  $c_m^*$  для потоков  $H_1$ ;  $H_2$ ;  $H_3$  и  $H_{16}$  (температура потоков не более  $50^\circ\text{C}$ );  $c_m^{**}$  – для потоков  $H_4$ ;  $H_5$ ;  $H_7$  и  $H_{15}$  ( $50^\circ\text{C} \leq t \leq 100^\circ\text{C}$ ) и  $c_m$  для потока  $H_{13}$  ( $t_{13} \leq 120^\circ\text{C}$ ). При проведении расчетов практически можно считать, что  $c_m \approx c_m^* \approx c_m^{**}$ .

В соответствии с цикломатической матрицей теплового ЦПГ базисные тепловые потоки ХТС определяются из уравнений:

$$H_3 = Q_1^* + H_1 - H_2 + H_{16}; \quad (40)$$

$$H_6 = H_5 - H_7; \quad (41)$$

$$H_8 = H_4 - H_7 + H_{13} - H_{15} = H_6 + H_{13} - H_{14}; \quad (42)$$

$$H_9 = Q_\Sigma - H_4 + H_{10} + H_{15}; \quad (43)$$

$$H_{11} = -Q_1^* - H_1 + H_2 + H_4 - H_{16} + H_{19} = H_{12} + H_{19}; \quad (44)$$

$$H_{12} = -Q_1^* - H_1 + H_2 + H_4 - H_{16} = H_4 - H_3; \quad (45)$$

$$H_{14} = -H_4 + H_5 + H_{15}; \quad (46)$$

$$\Delta 1 = H_{15} - H_{16}. \quad (47)$$

$$\Delta 2 = Q_1^* + H_1 - H_2 - H_4 + H_{10} + H_{16} - H_{19} + H_{22} = H_{10} - H_{11} + H_{22}. \quad (48)$$

Величины массовых расходов греющего пара  $D$  и охлаждающей воды  $L$  равны соответственно:

$$D = H_9/r \quad (49); \quad L = (\Delta 1 + \Delta 2)/\Delta t. \quad (50)$$

Алгоритм стратегии расчета тепловых нагрузок на элементы ХТС представляет собой ациклический ИГ и позволяет определить расход греющего пара  $D$ , когда величина коэффициента соотношения потоков  $\gamma$  изменяется. Зная материальные и тепловые нагрузки на элементы ХТС, можно приступить к проектированию каждого элемента ХТС.

## 5.2. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИГНАЛЬНЫХ ГРАФОВ ХТС

Найти решение СГ можно двумя методами: с применением эквивалентных преобразований исходного СГ к конечному; с применением универсальной топологической формулы (УТФ). Первый метод состоит в том, что исходный СГ при помощи правил эквивалентных преобразований сводится к конечному графу. Однако указанный метод является неудобным и весьма трудоемким, так как для определения значений переменных во всех вершинах исходного СГ этот граф необходимо столько раз преобразовывать к конечному СГ, сколько имеется зависимых вершин в исходном СГ.

Второй метод позволяет без использования эквивалентных преобразований непосредственно по топологическим свойствам исходного СГ составить выражения для его решения.

### 5.2.1. Эквивалентные преобразования сигнальных графов

Эквивалентные преобразования сигнальных графов – это операции устранения некоторых вершин и ветвей исходного графа с целью получения конечного графа, который явно отображает функциональные связи только между требуемыми вершинами.

истоком и вершиной-стоком. Метод эквивалентного преобразования, или упрощения СГ соответствует методу эквивалентного преобразования СЛУ путем исключения из уравнений ряда неизвестных. Исключение переменной в СЛУ соответствует устраниению в СГ определенной вершины. Неоднократно продолжая упрощения исходного СГ, можно определить решение СГ относительно одной вершины-стока.

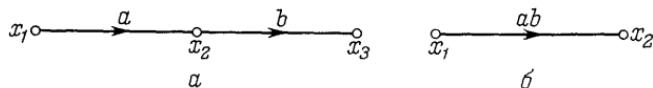


Рис. 5.10. Определение передачи последовательного соединения ветвей сигнального графа:

*a* – исходный граф; *b* – преобразованный граф

Для эквивалентного преобразования СГ используют следующие основные правила:

1) *передача последовательных ветвей* равна произведению передач этих ветвей (рис. 5.10). Действительно, если  $x_2 = ax_1$ ,  $x_3 = bx_2$ , то, делая подстановку  $x_2$ , получают:  $x_3 = abx_1$ ;

2) *передача параллельных ветвей* равна сумме передач этих ветвей (рис. 5.11). Доказательство:  $x_2 = ax_1 + bx_1 = (a + b)x_1$ ;

3) *удаление простой вершины*, т. е. такой вершины, которая не входит в контур или петлю СГ. Для СГ (рис. 5.12, *a*) имеем следующие уравнения:  $x_4 = ax_1$ ;  $x_2 = bx_4$ ;  $x_3 = cx_4$ . Следовательно,  $x_2 = abx_1$ ;  $x_3 = acx_1$ . Очевидно, что СГ на рис. 5.12, *b* эквивалентен СГ на рис. 5.12, *a*. Следовательно, при удалении простой вершины из СГ эта вершина в графе не рисуется, а все пути, проходящие через эту простую вершину, должны быть сохранены с изменением значений их коэффициентов передачи;

4) *исключение петли и контура*. Рассмотрим СГ (рис. 5.13), который имеет петлю с передачей  $T$ . Эту петлю можно устранить

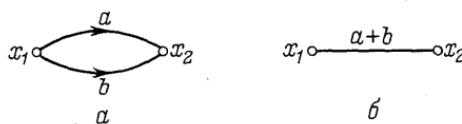


Рис. 5.11. Определение передачи параллельных одинаково направленных ветвей сигнального графа:

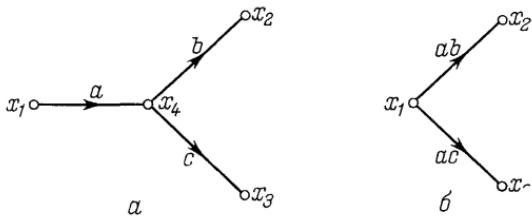
*a* – исходный граф; *b* – преобразованный граф

и получить эквивалентный СГ без петли (рис. 5.13, *b*):  $x_2 = ax_1 + Tx_2$ ;  $x_3 = bx_2$ . Из первого уравнения находим  $x_2 = ax_1/(1 - T)$ . Следовательно, исключение петли не изменяет числа вершин в СГ, а передачи ветвей, входящих в вершину, при которой существовала петля, уменьшаются в  $(1 - T)$  раз.

Для устраниния контура в СГ необходимо устраниТЬ любую одну вершину из этого контура, превратив его в петлю. Например, для СГ (рис. 5.14, *a*) имеем:  $x_2 = ax_1 + cx_3$ ;  $x_3 = bx_2$ ;

Рис. 5.12. Устранение простого узла в сигнальном графе:

*a* – исходный граф; *b* – преобразованный график



$x_4 = dx_3$ . Следовательно,  $x_3 = abx_1 + bcx_3$ ;  $x_4 = dx_3$ . Устранив петлю, получают:

$$x_3 = [ab/(1 - bc)]x_1; \quad x_4 = dx_3;$$

5) *инверсия прямого пути или контура*. Прямым путем СГ называют элементарный путь, соединяющий вершину-исток и вершину-сток СГ. Рассмотрим сущность операции инверсии СГ. Пусть имеется уравнение:  $x_3 = c(ax_1 + bx_2)$ , которому соответствует СГ (рис. 5.15, *a*): при этом  $x_1$  и  $x_2$  являются истоками, а  $x_3$  – сток. Можно изменить доли истока и стока, разрешив уравнение относительно  $x_1$  или  $x_2$ . Так, если считать  $x_3$  и  $x_2$  истоками, а  $x_1$  стоком, то получают новое уравнение  $x_1 = (1/ac)x_3 + (-b/a)x_2$ , которому соответствует новый СГ (рис. 5.15, *б*), при этом осуществлена инверсия прямого пути по сравнению с исходным СГ (рис. 5.15, *а*).

Для перехода от исходного сигнального графа к инвертированному графу необходимо выполнить следующие операции:

а) изменить направление всех ветвей прямого пути или контура на противоположное;

б) изменить передачи всех ветвей пути (или контура) от нового истока к новому стоку на обратные;

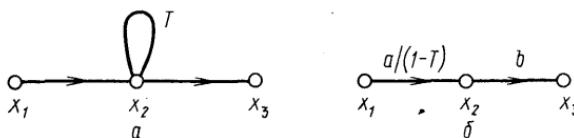


Рис. 5.13. Исключение петли сигнального графа:

*a* – исходный график; *б* – преобразованный график

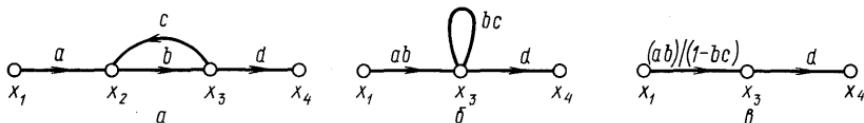


Рис. 5.14. Исключение контура сигнального графа:

*a* – исходный график; *б*, *в* – преобразованные графы

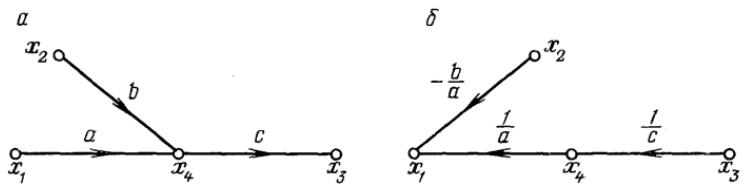


Рис. 5.15. Исходный сигнальный граф (а) и граф, в котором осуществлена инверсия прямого пути (б)

в) перенести конец ветви, касающейся инвертируемого пути (контура), т.е. соединяющей вершины, либо не являющиеся истоком и стоком пути, либо не принадлежащие пути (контуру) в новую вершину, в которую переносится инвертируемая ветвь пути (контура), оставив начало этой ветви в старой вершине. Передача этой касающейся ветви после переноса ее конца умножается на величину  $-1/a$ , где  $a$  – коэффициент передачи инвертируемой ветви;

г) коэффициент передачи инвертированного пути (контура) является обратной величиной коэффициента передачи исходного прямого пути (контура). Инверсия любой ветви некоторого пути (контура) вызывает инверсию всего рассматриваемого пути (контура).

Пример инверсии прямого пути от истока к стоку показан на рис. 5.16. Очевидно, что сложность исходного СГ понижается, так как в инверсном СГ полностью исключаются все контуры. Таким образом, инверсия может приводить к понижению сложности СГ, если СГ содержит несколько петель и не слишком много путей, параллельных инвертируемому пути.

Пример 5.3. Определить динамические характеристики колпачковой абсорбционной колонны, используя эквивалентные преобразования СГ этого аппарата. Чтобы полностью описать динамические режимы колонны, необходимо иметь четыре уравнения, выражающие зависимость состава газа на выходе аппарата от составов и расходов жидкости и газа, поступающих в колонну.

При выводе уравнений материального баланса для динамических режимов функционирования абсорбционной колонны используют следующие допущения: 1) количество газа над тарелкой мало по сравнению с количеством находящейся на ней жидкости; 2) эффективность тарелки 100%; 3) соотношение между

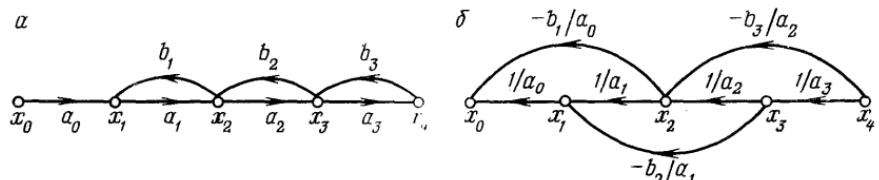


Рис. 5.16. Пример инверсии прямого пути сигнального графа:  
а – исходный граф; б – преобразованный граф

равновесными составами газа и жидкости выражается уравнением  $Y_n = mX_n + b$ ; 4) количества жидкости на всех тарелках одинаковы; 5) тепловым эффектом процесса абсорбции пренебрегают.

*Решение.* Для динамического режима материальный баланс переносимого компонента для  $n$ -й тарелки имеет следующий вид:

$$h = dx_n/dt = Q_{n-1} + R_{n+1} - Q_n - R_n \quad (1)$$

Все члены уравнения (1), вообще говоря, нелинейны. После линеаризации они могут быть представлены соотношениями:

$$\left. \begin{aligned} Q_n &= (dQ_n/dg)g + (dQ_n/dy_n)y_n; \\ R_n &= (dR_n/dl)l + (dR_n/dx_n)x_n, \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

где  $g$  и  $l$  — отклонения расходов газа и жидкости от установившихся значений;  $Q$  и  $R$  — отклонения содержания переносимого компонента газа и жидкости от установившихся значений.

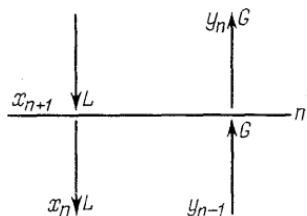


Рис. 5.17. Структура потоков на тарелках абсорбционной колонны

Значения частных производных таковы:

$$\left. \begin{aligned} dQ_n/dg &= Y_n; & dQ_n/dy_n &= G; \\ dR_n/dl &= X_n; & dR_n/dx_n &= L. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Подстановка их в уравнение (1) дает

$$Y_{n-1}g + Gy_{n-1} + X_{n+1}l + Lx_{n+1} - X_nl - Lx_n - Y_ng - Gy_n = h(dx_n/dt). \quad (4)$$

Из уравнения (4) могут быть получены четыре уравнения, связывающие регулируемую величину  $Y_n$  с одной из независимых переменных  $g$ ,  $l$ ,  $y_i$ ,  $x_i$ , смотря по тому, какая из них фактически изменяется. Когда  $g = l = x_i = 0$ , уравнение (4) дает соотношение между составом  $Y_n$  выходящего газа и составом поступающего в колонну газа. Уравнение (4) превращается в уравнение (см. рис. 5.17).

$$h(dx_n/dt) = Gy_{n-1} + Lx_{n+1} - Gy_n - Lx_n. \quad (5)$$

Положим, что начальные условия при  $t = 0$ :  $x_n = y_n = 0$ . В равновесном состоянии соотношение между составами газа и жидкости предположено в виде линейной зависимости, следовательно,  $y_n = (dY_n/dX_n)x_n = mx_n$ .

Преобразуя уравнение (5) и подставляя в него соотношение, соответствующее равновесному состоянию, получают:

$$y_{n+1} - [(G_m/L) + 1]y_n + (G_m/L)y_{n-1} = (h/L)(dy_n/dt) \quad (6)$$

Обозначив  $G_m/L = \lambda$  и  $h/L = a$ , преобразуют уравнение (6), используя принятые начальные условия:

$$\bar{y}_{n+1} - (1 + \lambda + as)\bar{y}_n + \lambda\bar{y}_{n-1} = 0.$$

Если обозначить  $(1 + \lambda + as) = c$ , то справедливо уравнение:  $\bar{y}_{n+1} = c\bar{y}_n + \lambda\bar{y}_{n-1} = 0$ .

Для верхней тарелки колонны справедливо следующее уравнение материального баланса:

$$G\bar{y}_2 - Lx_1 - Dx_D = h(dx_1/dt) \quad (7)$$

Подставляя значения  $x_D = y_1$ ,  $y_1 = mx_1$  и  $D = G - L$  в уравнение (7), получают  
 $(Gm/L)y_2 - y_1 - (Gm/L)y_1 + my_1 = (h/L)(dy_1/dt)$  (8)

или

$$\lambda y_2 = [1 + \lambda + (h/L)s - m] y_1 = (c - m) y_1. \quad (9)$$

На рис. 5.18, а показан исходный СГ, соответствующий уравнениям (7) и (9), а на рис. 5.18, б, в – результаты эквивалентных преобразований исходного СГ (для случая, когда число тарелок в колонне  $n = 3$ ). Для верхней тарелки колонны  $x_D = y_1$ . На второй тарелке (состав газа равен  $y_1$ ) в вершине  $y_2$  имеем

$$y_2 = (1/c)y_1 + (\lambda/c)y_3.$$

После эквивалентных преобразований СГ определяют, например, значение передаточной функции  $W_{2,3}$  (рис. 5.18, б)

$$W_{2,3} = y_2(s)/y_3(s) = (\lambda/c)\{1 - [(\lambda/c)(c - m)]\} = \lambda(c - m)/[c(c - m) - \lambda].$$

Теперь выведем уравнения, связывающие состав выходящего газа с изменяющимися расходами. Можно предположить, что изменение расхода мгновенно распространяется на всю колонну. Тогда  $x_i$ ,  $y_i$  и  $l$  равны нулю, и уравнение (4) превращается в уравнение:

$$Y_{n-1}g - Lx_{n+1} + Lx_n - Y_ng - Gy_n = h(dx_n/dt). \quad (10)$$

Уравнение (10) после введения в него величин  $a$ ,  $\lambda$  и  $c$  и осуществления преобразования Лапласа принимает вид:

$$(m/L)(Y_{n-1} - Y_n)\bar{g} - \bar{y}_{n+1} + \lambda\bar{y}_{n-1} = c\bar{y}_n.$$

Из условия установившегося состояния вытекает соотношение  $(m/L)(Y_{n-1} - Y_n) = \lambda^n(m/L)(Y_i - Y_1)$ . Обозначив  $(m/L)(Y_i - Y_1) = \beta$ , получают:

$$\beta\lambda^n\bar{g} + \bar{y}_{n+1} + \lambda\bar{y}_{n-1} = c\bar{y}_n. \quad (11)$$

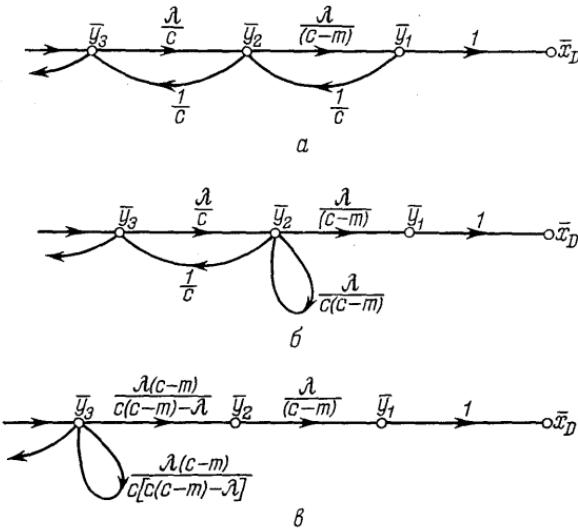
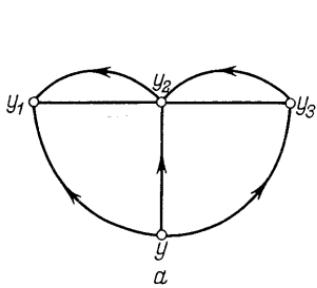
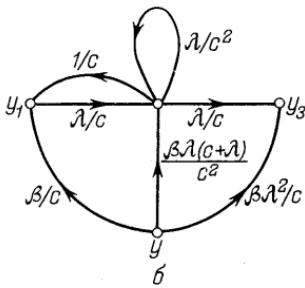


Рис. 5.18. Преобразование сигнального графа, соответствующего уравнениям материального баланса на верхнем уровне тарелки абсорбционной колонны:

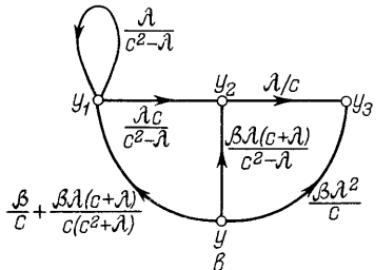
а – исходный граф; б, в – этапы преобразования графа



a



б



в

$$\frac{\lambda}{c^2 - \lambda} + \frac{\beta\lambda}{(c^2 - \lambda)(c^2 - 2\lambda)} + \frac{\beta\lambda^2(c + \lambda)}{c^2 - 2\lambda} + \frac{\beta\lambda^2}{c}$$

г

Рис. 5.19. Сигнальный граф, соответствующий уравнению для установившегося состояния в абсорбционной колонне (а) и этапы его преобразования (б-г)

Уравнение (11) можно представить в виде СГ, показанного на рис. 5.19, а. Вершины  $y_n$  соответствуют составу газа, уходящего с  $n$ -й тарелки. Данный СГ (рис. 5.19, а) построен для трехтарельчатой колонны. Анализ этого СГ показывает, что с увеличением числа тарелок представленный СГ расширяется простым добавлением подобных контуров. В результате эквивалентных преобразований СГ (рис. 5.19, б-г) определяют передаточную функцию  $W = y_3(s)/y(s)$  для трехтарельчатой абсорбционной колонны.

## 5.2.2. Метод решения сигнальных графов с применением универсальной топологической формулы

*Универсальная топологическая формула (УТФ) для решения СГ с одним истоком*, позволяющая определить коэффициент передачи  $T_{ij}(s)$  между сигналом-истоком и любым промежуточным сигналом или сигналом-стоком СГ на основе анализа топологических особенностей СГ, имеет следующий вид:

$$T_{ij}(s) = x_j(s)/x_i(s) = \left[ \sum_{k=1}^n P_k(s) \Delta_k(s) \right] / \Delta(s), \quad (5.7)$$

где  $x_i(s)$  — сигнал (строго говоря, изображение сигнала) в  $i$ -й вершине-истоке СГ, соответствующей свободной переменной ХТС;  $x_j(s)$  — сигнал в  $j$ -й вершине СГ, соответствующей базисной переменной;  $s$  — переменная преобразования Лапласа;  $P_k(s)$  — передача  $k$ -го прямого пути от истока  $i$  к стоку  $j$ ;  $n$  — число прямых путей СГ;  $\Delta$  — определитель СГ, величина которого равна

$$\Delta(s) = 1 - \sum_{m1} L_{m1}(s) + \sum_{m2} \Pi L_{m2}(s) - \sum_{m3} \Pi L_{m3}(s) + \dots, \quad (5.8)$$

$L_{m1}$  – передача  $m$ -го контура (петли) данного СГ;  $\Pi L_{mr}(s)$  –  $m$ -я возможная комбинация произведений передач  $r$  некасающихся контуров (петель) графа ( $r \geq 2$ );  $\Delta_k(s)$  – минор определителя  $\Delta$  исходного СГ, величина которого равна величине определителя  $\Delta^*$  для подграфа, который не касается  $k$ -го прямого пути в исходном графе.

Можно показать, что УТФ (5.7), по существу, является структурно-преобразованной формулой Крамера для решения СЛУ, когда лишь одно уравнение СЛУ имеет ненулевую правую часть.

Передача прямого пути  $P_k$  (контура –  $L_m$ ) равна произведению передач ветвей этого пути (контура).

Каждую совокупность элементарных конфигураций СГ путей, контуров (петель) можно характеризовать признаком – *касание*. Касающимися элементарными конфигурациями СГ называют пути, контуры (петли), имеющие хотя бы одну общую вершину

Пример 5.4. Выписать передачи всех контуров и прямых путей, начинающихся в истоке  $x_1$  и в вершине  $x_2$  для СГ, изображенного на рис. 5.20. Проанализировать касание контуров и путей данного СГ.

Решение. Передачи путей, начинающихся в вершине-истоке  $x_1$ :

$$P_{12} = b; P_{123} = bd; P_{1234} = bdf; P_{124} = be; P_{1243} = be; P_{13} = a; P_{132} = ac; P_{1324} = ace; P_{134} = af.$$

Передачи путей, начинающихся в вершине  $x_2$ :  $P_{24} = e; P_{243} = eg; P_{23} = d; P_{234} = df$ ;  $P_{ijk}$  – передача пути, содержащего вершины  $i, j, k$ .

Передачи контуров графа:  $L_{232} = dc; L_{343} = gf; L_{2432} = egc; L_{44} = l_0$ .

Касание контуров (значок касания  $\rightarrow$ ):  $L_{232} \rightarrow L_{343}; L_{232} \rightarrow L_{2432}; L_{2432} \rightarrow L_{44}; L_{343} \rightarrow L_{2432}; L_{343} \rightarrow L_{44}$ .

Касание путей и контуров СГ:  $P_{12} \rightarrow L_{232}; P_{12} \rightarrow L_{2432}; P_{1234} \rightarrow L_{2432}; P_{1234} \rightarrow L_{44}; P_{1234} \rightarrow L_{343}$ .

Некасание путей и контуров СГ (значок некасания  $\uparrow$ ):  $L_{232} \uparrow L_{44}; P_{12} \uparrow L_{44}; P_{12} \uparrow L_{343}$ .

Пример 5.5. Определить передачи  $T_{12} = x_2/x_1$  для СГ, изображенных на рис. 5.21, с применением УТФ (5.7).

Решение. Определение передачи  $T_{12}$  для СГ, изображенного на 5.21, а, поясняют следующие операции.

Определяют передачи путей и контуров СГ:

$$P_1 = ceb; P_2 = ab; L_1 = h; L_2 = fg; L_3 = de.$$

Касание контуров:  $L_1 \uparrow L_3; L_1 \rightarrow L_2; L_2 \rightarrow L_3$ .

Составляют выражения для миноров определителя  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  данного СГ:  $\Delta_1 = (1 - L_1) = (1 - h)$ , так как  $P_1 \rightarrow L_2; P_1 \rightarrow L_3, P_1 \uparrow L_1$ ;  $\Delta_2 = 1 - (L_1 + L_2) = 1 - h - fg$ , так как  $P_2 \uparrow L_1, P_2 \uparrow L_2$ .

Выражение для определителя СГ (5.8)

$$\Delta = 1 - (L_1 + L_2 + L_3) + L_1 L_3 = 1 - (h + fg + de) + hde.$$

Отсюда вычисляют:

$$T_{12} = [ceb(1 - h) + ab(1 - hfg)]/[1 - (h + fg + de) + hde].$$

Для определения при помощи УТФ (5.7) коэффициента передачи для СГ, изображенного на рис. 5.21, б, находят:

значения передач путей и контуров:  $P_1 = labcl; P_2 = lde; L_1 = ae; L_2 = bf; L_3 = cg; L_4 = dgfe$ ;

значения миноров  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  определителя СГ:

$$\Delta_1 = 1; \Delta_2 = 1 - bf \text{ и определителя СГ: } \Delta = 1 - (ae + fb + cg + dgfe) + aecg,$$

Рис. 5.20. Определение контуров и путей сигнального графа

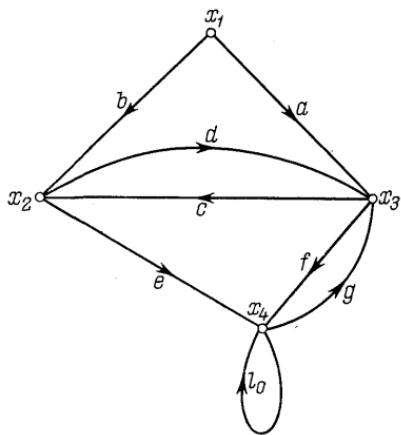
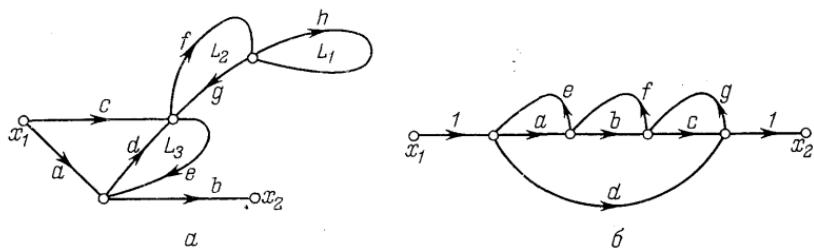


Рис. 5.21. Определение передачи  $T = x_2/x_1$  сигнальных графов (а, б) с применением топологической формулы



отсюда вычисляют:

$$T_{12} = [abc + d(1 - b\gamma)]/[1 - (ae + bf + cg + defg) + aecg].$$

Для решения СГ с одним истоком в том случае, когда необходимо определить передачу  $T_{is}$  между вершиной-истоком  $i$  и зависимым  $s$ -м узлом графа, непосредственно пользуются УТФ (5.7), так как любой зависимый узел может быть преобразован в сток.

Рассмотрим теперь задачу определения передачи между двумя зависимыми узлами СГ, когда непосредственное применение УТФ (5.7) невозможно. В этом случае передачу  $N_{pq}$  между зависимыми узлами СГ  $p$  и  $q$  можно определить таким образом:

$$N_{pq} = x_p/x_q = (x_p/x_i)/(x_q/x_i) = T_{ip}x_i/T_{iq}x_i = T_{ip}/T_{iq}.$$

Для определения величины  $N_{pq}$  необходимо с применением (УТФ) найти величины передач  $T_{ip}$  и  $T_{iq}$ , тогда получают

$$N_{pq} = T_{ip}/T_{iq} = \left[ \sum_{j=1}^n P_{ip,j} \Delta_{ip,j} \right] / \sum_{j=1}^k P_{iq,j} \Delta_{iq,j}. \quad (5.9)$$

УТФ (5.7) справедлива для СГ с одним истоком; однако никаких принципиальных трудностей не возникает в обобщении этой формулы на графы с несколькими истоками.

Для решения СГ с несколькими истоками возможны два способа, причем первый целесообразно применять в том случае,

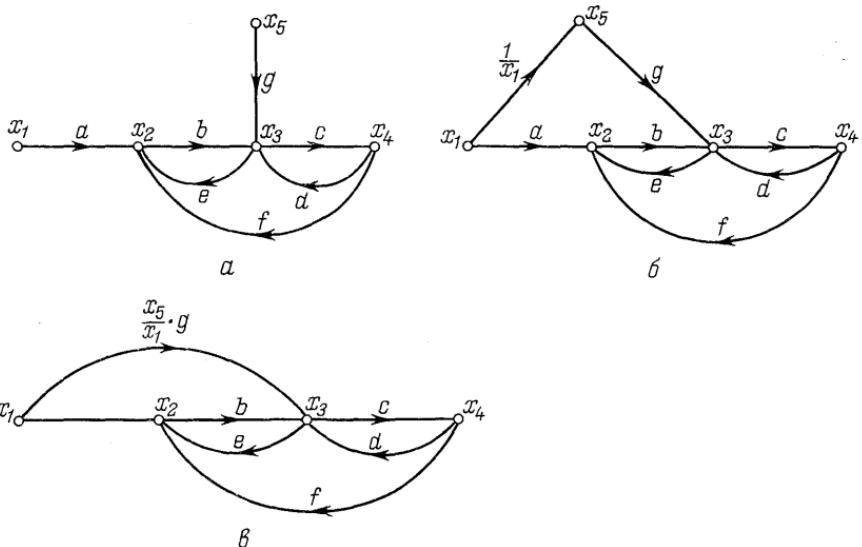


Рис. 5.22. Эквивалентное преобразование сигнального графа с двумя источниками (а) в граф с одним источником (б, в)

если требуется находить значения переменных, а второй – значения передач. По первому способу на основе принципа суперпозиции нужно применить УТФ (5.7) для каждого отдельного источника, положив другие источники равными нулю, и результаты вычислений сложить. По второму способу нужно преобразовать исходный СГ с несколькими источниками в СГ с одним источником.

Сущность такого преобразования поясняет СГ (рис. 5.22), который имеет два источника:  $x_1$  и  $x_5$ . Необходимо найти, например, передачу  $N_{41}$ . После добавления ветви  $(x_1, x_5)$  с передачей  $1/x_1$  (рис. 5.22, б) получают равносильный (эквивалентный) СГ, который, однако, содержит лишь один источник  $x_1$ . Используя правило объединения последовательных ветвей, получают СГ (рис. 5.22, в). СГ, изображ-

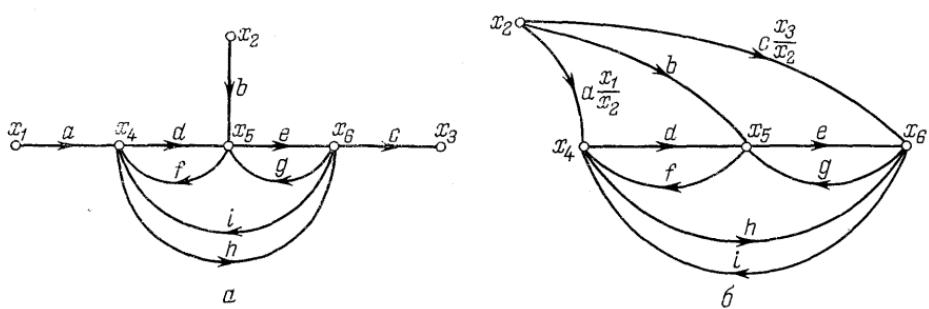


Рис. 5.23. Эквивалентное преобразование сигнального графа, имеющего три источника (а) в граф с одним источником (б)

женные на рис. 5.22, а и б, равносильны, так как составляющие переменной  $x_3$  одинаковы. Совпадение переменных в других узлах очевидно, так как сигналы в этих узлах не изменились. После получения нового СГ с одним истоком можно использовать УТФ и найти необходимую передачу. Если граф имеет более двух источников, указанную операцию следует проделать по отношению ко всем истокам.

Пример 5.6. Для СГ, изображенного на рис. 5.23, а определить передачу  $T_{52}$ .

*Решение.* Данный СГ сводят к графу с одним истоком (рис. 5.23, б) и применяют УТФ:

$$T_{52} = [b(1 - hi) + adx_1/x_2 + ahg x_1/x_2 + \\ + c g x_3/x_2 + cid x_3/x_2] / [1 - (df + eg + hi + hgf + ide)]$$

### 5.2.3. Формализованный метод решения сигнальных графов

Этот метод на основе УТФ (5.7) включает два этапа: 1) структурный анализ СГ; 2) расчет величины коэффициента передачи, или передаточной функции.

Этап структурного анализа СГ, или этап идентификации элементарных конфигураций СГ, состоит из следующих четырех операций: 1) идентификация прямых путей от вершин-истоков СГ; 2) идентификация контуров СГ; 3) определение подмножеств касающихся прямых путей и контуров; 4) определение комбинаций касающихся контуров.

Этап расчета величины коэффициента передачи состоит из следующих операций: 1) расчет значений передач контуров и прямых путей СГ; 2) расчет значений определителя СГ (5.8) и миноров определителя СГ; 3) расчет значения дробно-рациональной функции  $T_{ij}(s)$ .

Наибольшие трудности при разработке формализованного метода связаны с формализацией процедур определения подмножеств касающихся путей и контуров, а также различных комбинаций некасающихся (касающихся) контуров СГ. Указанные формализованные процедуры основаны на использовании теории множеств и исчисления высказываний (см. раздел 2.9). Рассмотрим процедуру определения касаний (некасаний) прямых путей и контуров СГ, которая сводится к определению множества вершин касания путей и контуров  $Z$ :

$$V: Z = X \cap Y,$$

где  $X \subset V$  – подмножество вершин, принадлежащих путем;  $Y \subset V$  – подмножество вершин, принадлежащих контурам;  $V = X \cup Y$  – множество вершин СГ, причем  $|V| = v$ .

Если  $Z = \emptyset$ , в данном СГ прямые пути не касаются контуров СГ. Если  $Z \neq \emptyset$ , то элементы множества  $Z$  являются вершинами СГ, по которым осуществляется касание путей и контуров.

Для формализации процедуры определения множества  $Z$  поставим в соответствие множеству  $X$  матрицу путей  $[P] = [p_{ik}]$ , строки которой соответствуют номерам путей, а столбцы – номерам

рам вершин СГ, исключая истоки и стоки. Общий элемент матрицы путей  $[P]$  равен:

$$p_{ik} = \begin{cases} 1, & \text{если } k \in X; \\ 0, & \text{если } k \notin X, \end{cases} \quad (5.10)$$

где  $i = \overline{1, n}$ ;  $n$  – число путей графа;  $k = \overline{1, v}$ .

Множеству  $Y$  поставим в соответствие матрицу контуров  $[L] = [l_{jk}]$ , строки которой соответствуют номерам контуров, а столбцы – номерам вершин СГ:

$$l_{jk} = \begin{cases} 1, & \text{если } k \in Y; \\ 0, & \text{если } k \notin Y, \end{cases}$$

где  $j = \overline{1, m}$ ;  $m$  – число контуров графа;  $k = \overline{1, v}$ .

Для определения касающихся прямых путей и контуров СГ необходимо рассмотреть матрицу касаний пути-контура – матрицу  $[F]$ , отображающую множество  $Z$ :

$$[F] = [P] \otimes [L^t],$$

где  $\otimes$  – символ логического произведения;  $t$  – символ транспонирования матрицы.

Общий элемент матрицы  $[F]$  равен:

$$f_{ij} = \bigvee (p_{ik} \wedge l_{kj}) = \begin{cases} 1, & \text{если } i\text{-й путь касается} \\ & \text{ } j\text{-го контура} \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases} \quad (5.11)$$

Касание контуров СГ по  $r$  отображается совокупностью  $m$  множеств касаний контуров  $Z_{mr}$ :

$$Z_{mr} = \cap Y_{imr},$$

где  $Y_{imr}$  – подмножество вершин СГ, принадлежащих  $i$ -му контуру, входящему в  $m$ -ю комбинацию из  $r$  контуров;  $i = 1, k$ ;  $k$  – число контуров СГ.

Для определения бинарных касаний (некасаний) контуров ( $r = 2$ ) введем матрицу бинарных касаний контуров графа  $[F_{(2)}] = [f_{(2)ij}]$ , которая отображает  $m$  комбинаций множеств бинарных касаний контуров  $Z_{m2}$ :

$$[F_{(2)}] = [L] \times [L^t]. \quad (5.12)$$

Общий элемент матрицы  $[F_{(2)}]$  равен:

$$f_{(2)ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } i\text{-й контур касается} \\ & \text{ } j\text{-го контура;} \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (5.13)$$

Матрица  $[F_{(2)}]$  является симметричной, поэтому для получения информации о бинарном касании контуров достаточно вычислить лишь верхнюю (нижнюю) треугольную подматрицу матрицы  $[F_{(2)}]$ .

Касания контуров исходного СГ при  $r \geq 2$  можно отобразить в виде некоторого графа. С этой целью поставим в соответствие

матрице  $[F_{(2)}]$  альтернативную матрицу  $[F_{(2)}^*]$ , общий элемент которой  $f_{(2)ij}^* = \bar{1}_{(2)ij}$ , где  $\bar{1}$  – символ логического отрицания. Матрица  $[F_{(2)}^*]$  представляет собой матрицу смежности некоторого неориентированного графа некасания контуров исходного СГ-графа  $G^*$ . Вершины графа  $G^*$  соответствуют контурам исходного СГ, ребра отображают некасание контуров исходного СГ. Вершины графа  $G^*$ , образующие его циклы длины  $r > 2$ , отображают комбинации некасающихся контуров исходного СГ при  $r > 2$ .

Следует отметить, что при большом числе контуров в исходном СГ такая процедура определения комбинаций некасающихся контуров при  $r > 2$ , основанная на идентификации циклов в неориентированном графе  $G^*$ , является несколько трудоемкой.

Для определения комбинаций, касающихся контуров при  $r > 2$ , будем рассматривать операции логического объединения подмножеств комбинаций касающихся контуров, отображаемых строками матриц касаний контуров при  $r \geq 2$  – матриц  $[F_{(2)}]$ ,  $[F_{(3)}]$  и т. д.

Для этого при помощи матрицы бинарных касаний контуров  $[F_{(2)}]$  построим матрицу тройных касаний контуров – матрицу  $[F_{(3)}] = [f_{(3)ks}]$ :

$$[F_{(3)}] = [\bar{f}_{(2)i} U \bar{f}_{(2)j}], \quad (5.14)$$

где  $\bar{f}_{(2)i} \subset [F_{(2)}]$  –  $i$ -я вектор-строка, которой принадлежит  $j$ -й элемент  $f_{ij} = 0$  верхней (нижней) треугольной подматрицы  $[F_{(2)}]$ ;  $\bar{f}_{(2)j} \subset [F_{(2)}]$  –  $j$ -я вектор-строка с номером  $j$ -го столбца, которому принадлежит элемент  $i$ -й строки  $f_{ij} = 0$  верхней (нижней) треугольной подматрицы  $[F_{(2)}]$ . Общий элемент матрицы  $[F_{(3)}]$  равен:

$$f_{(3)ks} = \begin{cases} 1, & \text{если } k\text{-я комбинация из двух некасающихся контуров} \\ & (\text{$i$-го и $j$-го контура) касается $s$-го контура;} \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (5.15)$$

По информации о тройных касаниях контуров, представленной матрицей  $[F_{(3)}]$ , построим матрицу касаний контуров по четыре–матрицу  $[F_4]$  вида:

$$[F_4] = [\bar{f}_{(3)i} U \bar{f}_{(3)j}]. \quad (5.16)$$

Комбинации касаний из  $r > 2$  контуров исходного СГ в общем случае можно определить при помощи матрицы  $[F_{(r)}$ ], которая получается путем логического объединения соответствующих векторов-строк матрицы касаний контуров по  $(r - 1)$ –матрицы  $[F_{(r - 1)}]$ :

$$[F_r] = [f_{(r - 1)i} U \bar{f}_{(r - 1)j}], \quad (5.17)$$

где  $\bar{f}_{(r - 1)i}$  –  $i$ -я вектор-строка, которой принадлежит  $j$ -й элемент  $f_{(r - 1)ij} = 0$  матрицы  $[F_{(r - 1)}]$ ;  $\bar{f}_{(r - 1)j}$  –  $j$ -я вектор-строка с номером

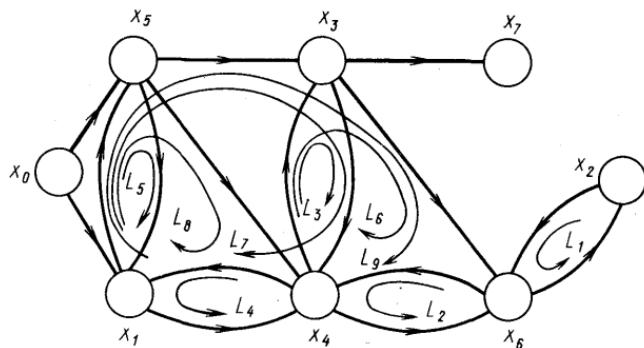


Рис. 5.24. Сигнальный граф (L<sub>i</sub> – i-й контур)

j-го столбца, которому принадлежит элемент i-й строки f<sub>(r-1)ij</sub> = 0 матрицы [F<sub>(r-1)</sub>].

Общий элемент матрицы [F<sub>(r)</sub>] равен:

$$f_{(r)ks} = \begin{cases} 1, & \text{если } k\text{-я комбинация из } (r-1) \text{ некасающихся} \\ & \text{контуров касается } s\text{-го контура;} \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases} \quad (5.18)$$

Покажем применение некоторых основных этапов формализованного метода для решения СГ, изображенного на рис. 5.24. Необходимо определить касания прямых путей данного СГ, проходящих из истока x<sub>0</sub> через промежуточную вершину x<sub>1</sub> к стоку x<sub>7</sub>, и контуров СГ. Матрицы [P] и [L] для этого СГ:

$$[P] = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{bmatrix};$$

$$[L] = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 4 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 7 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 8 & 1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ 9 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

В соответствии с соотношениями (5.10) и (5.11) матрица касаний пути – контуры  $[F]$  для СГ равна:

$$[F] = \begin{matrix} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{matrix} \right] \end{matrix}.$$

Из рассмотрения матрицы  $[F]$  следует, что  $P_1 \uparrow L_1$ ;  $P_1 \uparrow L_2$ ;  $P_3 \uparrow L_1$  и т. д. Далее определим комбинации касаний контуров СГ и построим неориентированный граф некасаний контуров  $G_f^*$ . Матрица бинарных касаний контуров  $[F_{(2)}]$  исходного СГ имеет вид:

$$[F_{(2)}] = \begin{matrix} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \\ 8 \\ 9 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{matrix} \right] \end{matrix}.$$

Касания контуров исходного СГ отображают с помощью неориентированного графа  $G_f^*$  (рис. 5.25). Из анализа графа  $G^*$  видно, что исходный СГ содержит лишь одну комбинацию некасающихся контуров по  $r \geq 2$ :  $L_1 \uparrow L_3$ ;  $L_1 \uparrow L_5$ ;  $L_3 \uparrow L_5$ . Определим касания контуров СГ, используя формальную процедуру построения матриц  $[F_{(r)}]$ . Применяя матрицу бинарных касаний  $[F_{(2)}]$  по соотношению (5.14), построим матрицу тройных касаний, которая содержит только три нулевых элемента:

$$[F_{(3)}] = \begin{matrix} & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ \begin{matrix} 1,3 \\ 1,4 \\ 1,5 \\ 1,7 \\ 1,8 \\ 2,5 \\ 3,5 \\ 5,6 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{matrix} \right] \end{matrix}.$$

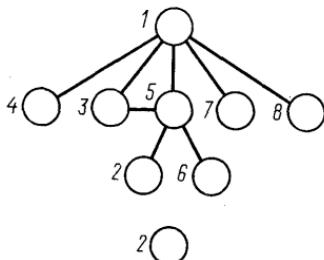


Рис. 5.25. Неориентированный граф некасаний контуров  $G^*$  для сигнального графа (см. рис. 5.24) (номера узлов соответствуют номерам контуров)

## 5.3. ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ МЕТОД АНАЛИЗА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ ХТС НА ОСНОВЕ СИГНАЛЬНЫХ ГРАФОВ

### 5.3.1. Характеристики чувствительности ХТС

Такие характеристики представляют собой прямые оценки – функции чувствительности и косвенные оценки – логарифмическую чувствительность (см. раздел 1.7). Функции чувствительности ХТС по отношению к вариациям параметров определяют следующим образом:

$$u_{ij}(t, \alpha^\circ) = dY_i(t, \alpha_1, \dots, \alpha_m) / d\alpha_j|_{\alpha^\circ}, \quad (5.19)$$

или

$$u_{ij}^*(t, \alpha^\circ) = dY_i(t, \alpha_1, \dots, \alpha_m) / d \ln \alpha_j|_{\alpha^\circ}, \quad (5.20)$$

где  $u_{ij}(t, \alpha^\circ)$  – функция чувствительности ХТС;  $u_{ij}^*(t, \alpha^\circ)$  – полулогарифмическая функция чувствительности ХТС к бесконечно малым вариациям параметров оборудования элементов в окрестности некоторого номинального (расчетного) режима;  $Y_i(t, \alpha_1, \dots, \alpha_m)$  – выходная переменная (координата), или характеристика, ХТС;  $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_m)$  – вектор параметров элементов системы;  $\alpha^\circ$  – вектор параметров при номинальном режиме.

*Логарифмическая (полулогарифмическая) чувствительность* ХТС определяется по следующим формулам:

$$S_a^W = d \ln W(s, \alpha) / d \ln \alpha = (dW(s, \alpha) / W(s, \alpha)) / (d\alpha / \alpha), \quad (5.21)$$

или

$$\tilde{S}_a^W = dW(s, \alpha) / d \ln \alpha, \quad (5.22)$$

где  $S_a^W$  ( $\tilde{S}_a^W$ ) – логарифмическая (полулогарифмическая) чувствительность ХТС;  $W(s, \alpha)$  – коэффициент матрицы преобразований, или передаточная функция ХТС;  $\alpha$  – варьируемый параметр;  $s$  – комплексная переменная преобразования Лапласа.

Из уравнения (5.21) следует, что логарифмическая чувствительность  $S_a^W$  представляет собой отношение относительной вариации передаточной функции системы  $W(s, \alpha)$  к относительной вариации параметра  $\alpha$ , вызвавшего эту вариацию передаточной функции ХТС.

С помощью оценок чувствительности можно не только определить степень влияния того или другого параметра на выходные координаты (характеристики) ХТС, но и найти отклонение выходных координат (характеристик) при варьировании параметра от выходных координат (характеристик) ХТС с неизменными

параметрами как функцию времени. В дальнейшем процесс функционирования ХТС будем в общем случае называть *движением системы*. ХТС, в которой параметры соответствуют номинальному режиму и не претерпевают вариаций, называют *исходной системой*, а движение исходной системы – *основным движением*. ХТС, в которой произошли вариации параметров, называют *варьированной системой*, а ее движение – *варьированным движением*. Разность между варьированным и основным движением называют *дополнительным движением* ХТС.

Рассмотрим исходную ХТС, движение которой описывается нелинейными обыкновенными дифференциальными уравнениями (ОДУ) в форме Коши:

$$dy_i/dt = f_i(y_1, \dots, y_n, t, a_1, \dots, a_m) \quad (5.23)$$

при начальных условиях

$$t_0(a_j), y_{10}(a_j), \dots, y_{n0}(a_j), \quad (5.24)$$

где  $y_i$  – фазовые координаты системы;  $a_j$  – параметры системы,  $i = \overline{1, n}$ ,  $j = \overline{1, m}$ .

Если ввести в рассмотрение матрицы-столбцы, соответствующие векторам фазовых координат ХТС и нелинейных функций

$$\bar{Y} = \{y_1, \dots, y_n\}, \bar{F} = \{f_1, \dots, f_n\},$$

то систему (5.23) можно записать в матричной форме:

$$d\bar{Y}/dt = \bar{F}(Y, t, a). \quad (5.25)$$

Рассмотрим метод вычисления вектора функций чувствительности ХТС  $\bar{u}(t, a)$ . Вектор функций чувствительности ХТС в общем виде для системы (5.25) определяется выражением:

$$\bar{u}(t, a) = d\bar{Y}(t, a)/da. \quad (5.26)$$

Учитывая, что вектор  $\bar{Y}(t, a) = Y[t, \bar{Y}_0(a), t_0(a), a]$  является сложной функцией от  $a$ , можно также написать

$$\bar{u}(t, a) = (\partial \bar{Y}/\partial y_0)(dY_0/da) + (\partial \bar{Y}/\partial t_0)(dt_0/da) + \partial Y/\partial a. \quad (5.27)$$

Таким образом, вычисление вектора функций чувствительности связано с вычислением производных от решения уравнений (5.23) по начальным условиям, начальному моменту времени и параметру  $a$ . Условия, при которых такие производные заведомо существуют, устанавливает следующая теорема: пусть правые части уравнений (5.25) непрерывны по  $t$  и допускают непрерывные частные производные по  $y_1, \dots, y_n, a$ ; пусть также функции  $t_0(a)$ ,  $\bar{Y}_0(a)$  непрерывно диффундируемые по  $a$ , тогда вектор функций чувствительности  $\bar{u}(t, a)$  является решением *дифференциального уравнения чувствительности*:

$$d\bar{u}/dt = (\partial \bar{F}/\partial \bar{Y})\bar{u} + \partial \bar{F}/\partial a; \quad (5.28)$$

с начальными условиями

$$\bar{u}(t_0) = d\bar{Y}_0/d\alpha - \bar{F}(\bar{Y}_0, t_0, \alpha) \cdot (dt_0/d\alpha) = dY_0/d\alpha - Y_0(dt_0/d\alpha). \quad (5.29)$$

Матрицу  $\partial\bar{F}/\partial\bar{Y}$  и вектор  $\partial\bar{F}/\partial\alpha$  вычисляют на рассматриваемом однопараметрическом семействе решений. При выполнении условий теоремы вектор  $\bar{u}(t, \alpha)$  является непрерывной функцией обоих аргументов.

Таким образом, при известном рассматриваемом однопараметрическом семействе решений вычисление вектора функций чувствительности XTC может быть сведено к решению системы линейных дифференциальных уравнений с переменными коэффициентами (5.28), являющихся уравнениями чувствительности XTC.

Следует подчеркнуть, что практически при сформулированных требованиях уравнения чувствительности XTC (5.28) могут быть получены формальным дифференцированием по  $\alpha$  исходных уравнений (5.25). Используя это обстоятельство, можно сразу составлять уравнения, определяющие функции чувствительности XTC, не приводя предварительно уравнений рассматриваемой системы к нормальной форме Коши.

Функции чувствительности XTC (5.19) в принципе могут быть определены не путем интегрирования уравнений чувствительности (5.28), а дифференцированием по варьируемому параметру решения дифференциальных уравнений движения исходной XTC. В общем случае аналитические выражения для решения уравнений движения исходной XTC и уравнений чувствительности не могут быть получены. Поэтому для определения функций чувствительности приходится интегрировать уравнение чувствительности совместно с уравнениями движения исходной XTC с использованием аналоговых и цифровых моделей. Построение дополнительного движения XTC с использованием функций чувствительности удобнее, чем нахождение решений (даже на моделях) и их вычитание, так как оно позволяет получить решение в увеличенном масштабе (или при соответствующим образом выбранном масштабе вариаций  $\Delta\alpha_j$ ) и избежать существенных погрешностей, возникающих при нахождении малых разностей больших величин непосредственным вычитанием.

Пример 5.9. Для XTC, состоящей из последовательного соединения двух элементов идеального смешения (рис. 5.26), определить функции чувствительности выходных концентраций вещества  $c_1(t)$  и  $c_2(t)$  к изменению технологического параметра первого элемента  $\tau_{11} = 1/\tau_{11}^*$ , где  $\tau_{11}^*$  – среднее время пребывания.

*Решение.* Система уравнений материального баланса данной XTC имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} dc_1/dt &= -(L_1/V_1)c_1 + (L_0/V_1)c_0; \\ dc_2/dt &= (L_1/V_2)c_1 - (L_2/V_2)c_2 \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

при начальных условиях  $c_1(0) = c_2(0) = 0$ , где  $L_i$  – массовый расход  $i$ -го технологического потока;  $V_1 = \text{const}$  ( $V_2 = \text{const}$ ) – объем первого (второго) элемента,  $\tau_{11} = 1/\tau_{11} = V_1/L_1$  – варьируемый параметр XTC.

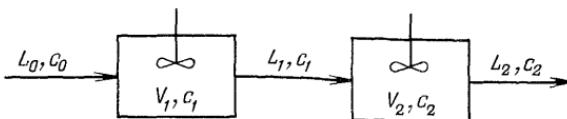


Рис. 5.26. Структурная схема каскада реакторов идеального смешения

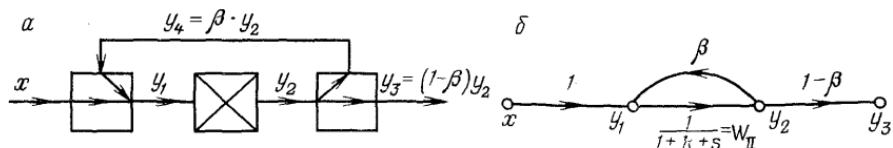


Рис. 5.27. Операторная схема одноконтурной XTC (a) и сигнальный график, соответствующий системе уравнений материального баланса этой XTC (b)

Перепишем СУ (1) следующим образом:

$$\left. \begin{array}{l} f_1: dc_1/dt = -\tau_{11}c_1 + a_{12}c_0; \\ f_2: dc_2/dt = \tau_{21}c_1 - \tau_{22}c_2 \end{array} \right\} \quad (2)$$

Необходимо определить следующие функции чувствительности XTC:

$$\begin{aligned} u_{11} &= \partial c_1 / \partial \tau_{11}; \quad u_{21} = \partial c_2 / \partial \tau_{11}; \\ du_{11} / \partial t &= \frac{\partial}{\partial \tau_{11}}(dc_1 / dt), \quad du_{21} / \partial t = \frac{\partial}{\partial \tau_{11}}(dc_2 / dt). \end{aligned}$$

Для определения функций чувствительности  $u_{11}$  и  $u_{21}$  составим дифференциальные уравнения чувствительности XTC вида (5.28), коэффициентами которых являются следующие величины:

$$\partial f_1 / \partial c_1 = \frac{\partial}{\partial c_1}(-\tau_{11}c_1 + a_{12}c_0) = -\tau_{11};$$

$$\partial f_1 / \partial c_2 = 0; \quad \partial f_2 / \partial c_1 = \frac{\partial}{\partial c_1}(\tau_{21}c_1 - \tau_{22}c_2) = \tau_{21};$$

$$\partial f_2 / \partial c_2 = \tau_{22}; \quad \partial f_1 / \partial \tau_{11} = c_1; \quad \partial f_2 / \partial \tau_{11} = 0.$$

Матричное дифференциальное уравнение чувствительности данной XTC имеет вид:

$$\begin{bmatrix} du_{11} / dt \\ du_{21} / dt \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \tau_{11} & 0 \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} u_{11} \\ u_{21} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (3)$$

В установившемся режиме  $du_{11} / dt = 0$  и  $dc_i / dt = 0$ , следовательно, решая уравнение (3), получают:

$$u_{11} = -c_1 / \tau_{11}; \quad u_{21} = (\tau_{21} / \tau_{22})u_{11} = (\tau_{21} / \tau_{22})(c_1 / \tau_{11}).$$

Пример 5.10. Для XTC, операторная схема которой изображена на рис. 5.27, а, определить логарифмическую функцию чувствительности общего

коэффициента передачи XTC  $W$ , к изменению коэффициента функциональной связи оператора разделения величины  $\beta$ .

*Решение.* Составляют СУ материального баланса XTC в операторной форме:

$$\begin{cases} \tilde{y}_1(s) = \tilde{x}(s) + \beta\tilde{y}_2(s); \\ y_2(s) = \tilde{y}_1(s)/(1 + k + s); \\ \tilde{y}_3(s) = (1 - \beta)\tilde{y}_2(s) \end{cases} \quad (1)$$

где  $\tilde{x}(s)$ ,  $\tilde{y}_i(s)$  – концентрации;  $k$  – коэффициент, учитывающий кинетические характеристики оператора химического превращения;  $s$  – комплексная переменная преобразования Лапласа.

Полученной СУ (1) соответствует сигнальный граф (см. рис. 5.27, б), из рассмотрения которого определяют величину общего коэффициента передачи XTC:

$$W_s = \tilde{y}_3/\tilde{x} = (1 - \beta)/[(1 - \beta) + (k + s)]. \quad (2)$$

В соответствии с выражением (5.21) логарифмическая чувствительность  $S_\beta^W$  равна:

$$S_\beta^W = \frac{\partial}{\partial \beta} \frac{1 - \beta}{[(1 - \beta) + (k + s)]} \frac{(1 - \beta) + (k + s)}{(1 - \beta)} \beta = - \frac{\beta(k + s)}{(1 - \beta)[(1 - \beta) + (k + s)]}.$$

В установившемся режиме функционирования XTC ( $s \rightarrow 0$ ;  $t \rightarrow \infty$ ):

$$S_\beta^W = (-\beta k)/[(1 - \beta)(1 - \beta + k)].$$

### 5.3.2. Топологический метод расчета логарифмической чувствительности XTC по сигнальному графу

Выразим логарифмическую чувствительность XTC – величину через коэффициенты передачи СГ  $G$ . Подставляя в формулу (5.21) значение общей передаточной функции XTC, определяемое из сигнального графа XTC с помощью УТФ (5.7), получают:

$$S_\alpha^W = \partial \ln \left( \sum_{i=1}^n P_i \Delta_i \right) / \partial \ln \alpha - \partial \ln \Delta / \partial \ln \alpha. \quad (5.30)$$

Оба члена в правой части выражения (5.30) имеют ту же форму, что и логарифмическая чувствительность XTC (5.21), поэтому уравнение (5.30) можно переписать в виде:

$$S_\alpha^W = S_\alpha^\Sigma - S_\alpha^\Delta, \quad (5.31)$$

где  $S_\alpha^\Sigma$  – логарифмическая чувствительность прямых путей СГ;  $S_\alpha^\Delta$  – логарифмическая чувствительность определителя СГ.

Определитель СГ  $\Delta$  является линейной функцией произведений передаточных функций различных контуров графа, поэтому

$$\alpha(\partial \Delta / \partial \alpha) = \Delta_\alpha, \quad (5.32)$$

где  $\Delta_\alpha$  – определитель, в котором оставлены только члены, содержащие  $\alpha$ .

Тогда

$$\Delta - \Delta_\alpha = \Delta - \alpha(\partial \Delta / \partial \alpha) = \Delta^\circ, \quad (5.33)$$

где  $\Delta^\circ$  – определитель СГ системы, из которого удалена ветвь  $\alpha$ .

Таким образом, логарифмическая чувствительность определятеля СГ выражается формулой:

$$S_a^\Delta = (\partial \Delta / \Delta) / (\partial a / a) = a (\partial \Delta / \partial a) (1 / \Delta) = 1 - \Delta^0 / \Delta. \quad (5.34)$$

Рассмотрим слагаемое  $S_a^\Sigma$  в уравнении (5.31). Проведя аналогичные рассуждения, как при выводе (5.34), можно найти выражение для чувствительности прямых путей СГ:

$$S_a^\Sigma = 1 - \left( \sum_i P_i \Delta_i \right) / \sum_i P_i \Delta_i, \quad (5.35)$$

где  $\left( \sum_i P_i \Delta_i \right)^0$  представляет собой величину  $\sum_i P_i \Delta_i$ , в которой все члены, содержащие элемент  $a$ , равны нулю.

Таким образом, чувствительность передаточной функции ХТС по отношению к элементу  $a$  равна:

$$S_a^W = \Delta^0 / \Delta - \left( \sum_i P_i \Delta_i \right)^0 / \sum_i P_i \Delta_i, \quad (5.36)$$

где верхний индекс «0» означает проведение операций вычисления значений  $\Delta$  и  $\sum_i P_i \Delta_i$  при нулевом значении  $a$ .

Физический смысл полученного выражения логарифмической чувствительности (5.36) и его связь с топологией СГ можно выяснить, если отдельно рассмотреть оба члена правой части уравнения (5.36). Первый член определяется только структурой контуров СГ и, следовательно, не зависит ни от выбора истоков и стоков, ни от ветвей, не входящих в контуры. Второй член, наоборот, зависит от прямых путей и от тех контуров, передаточные функции которых содержатся в соответствующих минорах определителя СГ.

Поэтому выбор истоков и стоков влияет на величину этого члена. Можно показать, что первый член в правой части уравнения (5.36), который следует отличать от чувствительности определителя СГ  $S_a^\Delta$ , равен обратному значению обратной разности, вычисленной по отношению к элементу  $a$ . Дальнейшее рассмотрение свойств логарифмической чувствительности ХТС, исходя из особенностей СГ будет проведено на следующих типовых случаях расположения варьируемой ветви  $a$ :

1) ветвь  $a$  расположена на прямом пути и входит в один из контуров СГ. В этом случае очевидно, что  $S_a^\Sigma = 1$ , следовательно:

$$S_a^W = \Delta^0 / \Delta = 1 - \Delta_a / \Delta; \quad (5.37)$$

2) ветвь  $a$  расположена на прямом пути и не входит ни в один из контуров СГ, следовательно,  $\Delta = \Delta^0$ ,  $S_a^\Delta = 0$ , отсюда

$$S_a^W = 1. \quad (5.38)$$

Если в сигнальном графе вообще не содержится контуров, то

$$S_a^W \equiv 1;$$

3) ветвь  $a$  не расположена на прямом пути, но входит в контур, соприкасающийся с прямым путем. В этом случае  $S_x^\Sigma = 0$ , откуда следует, что

$$S_x^W = \Delta^\circ/\Delta - 1 = \Delta a/\Delta; \quad (5.39)$$

4) ветвь  $a$  не соприкасается с прямым путем, т. е. входит в контур, не касающийся прямого пути. В этом случае

$$S_x^W = \Delta^\circ/\Delta - \sum_{i=1}^n \beta_i (\Delta_i^\circ/\Delta_i), \quad (5.40)$$

где  $\beta_i = P_i \Delta_i / \sum_i P_i \Delta_i$ ;

5) функция  $S_x^W$  равна нулю. Это означает, что передаточная функция всего СГ совершенно не зависит от изменений параметра  $a$ .

Из рассмотрения выражения (5.36) можно установить, что основное требование (для обеспечения нулевой логарифмической чувствительности ХТС) заключается в том, чтобы обеспечить выполнение соотношения  $\Delta^\circ/\Delta = (\sum P_i \Delta_i)^\circ / \sum P_i \Delta_i$ .

Обычно это требование выполняется в системах с «нулевой чувствительностью», когда  $\sum_i P_i \Delta_i / \sum_i P_i \Delta_i = 0$ , а  $\Delta^\circ/\Delta$  обращается в нуль при дискретных значениях комплексной частоты  $s$ . Эти значения частоты являются либо нулями  $\Delta^\circ$ , либо полюсами  $\Delta$ . Однако невозможно получить нулевую чувствительность ХТС, обеспечивая выполнение соотношений  $\Delta^\circ/\Delta = (\sum P_i \Delta_i)^\circ / \sum P_i \Delta_i \equiv 1$ , так как рассмотренные выше случаи 1 и 3 являются альтернативными вариантами.

#### 5.4. МАТРИЧНЫЙ МЕТОД АНАЛИЗА ХТС

Матричный метод анализа ХТС – это метод определения эквивалентности матриц преобразования ХТС  $[R_s]$  по заданным матричным блок-схемам (МБС) систем (см. раздел 3.5) с использованием правил свертки, или правил эквивалентного преобразования, матричных блок-схем ХТС.

Правила эквивалентного преобразования МБС основаны на вычислении эквивалентных матриц преобразований для различных соединений матричных блоков, имеющих общий вход и выход, с использованием операций матричного исчисления.

Выведем основные правила эквивалентного преобразования МБС. Рассмотрим сначала последовательное соединение двух матричных блоков (рис. 5.28, а). Уравнение первого матричного блока имеет вид:

$$\bar{Y} = [R_1] \bar{X}, \quad (5.41)$$

где  $\bar{Y}$ ,  $\bar{X}$  – векторы;  $[R_1]$  – матрица преобразования.

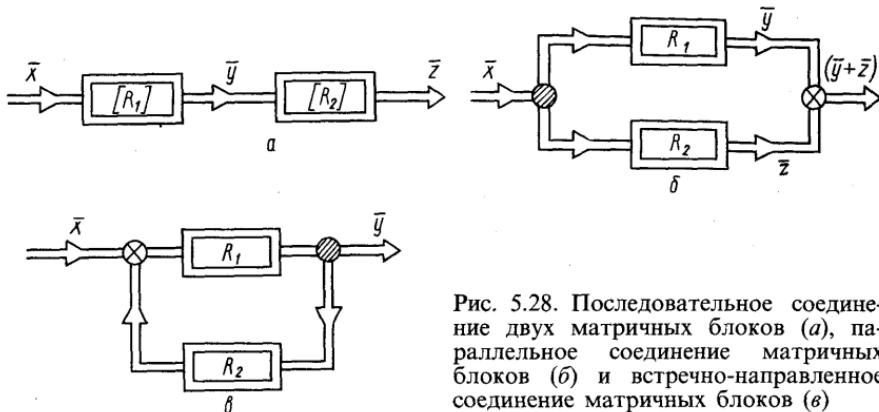


Рис. 5.28. Последовательное соединение двух матричных блоков (а), параллельное соединение матричных блоков (б) и встречечно-направленное соединение матричных блоков (в)

Аналогично для второго матричного блока:

$$\bar{Z} = [R_2] \bar{Y}. \quad (5.42)$$

Для приведения этих двух блоков к одному равносильному выражению переменных \$z\_i\$ через \$x\_i\$ необходимо исключить промежуточные переменные \$y\_i\$. Подставляя в (5.42) значение \$\bar{Y}\$ из (5.40), получают:

$$\bar{Z} = [R_2][R_1]\bar{X} = [R_3]\bar{X}, \quad (5.43)$$

где \$[R\_3] = [R\_2][R\_1]\$ – эквивалентная матрица преобразования, или передаточная матрица последовательного соединения двух матричных блоков.

Обобщая результат на произвольное число последовательно соединенных матричных блоков, получают

$$[R_3] = [R_n][R_{n-1}] \dots [R_2][R_1]. \quad (5.44)$$

Рассмотрим параллельные соединения матричных блоков (рис. 5.28, б). Нетрудно видеть, что передаточные матрицы параллельно включенных матричных блоков должны иметь одинаковую структуру. Передаточная матрица параллельного соединения двух матричных блоков равна

$$[R_3] = [R_1] + [R_2], \quad (5.45)$$

где \$[R\_3]\$ – передаточная матрица параллельного соединения матричных звеньев.

Рассмотрим теперь соединение матричных блоков (рис. 5.28, в) по схеме обратной связи (встречно-направленное).

Для МБС, приведенной на рис. 5.28, в, можно написать

$$\bar{Y} = [R_1](\bar{X} + \bar{Z}); \quad (5.46)$$

$$\bar{Z} = [R_2]\bar{Y}, \quad (5.47)$$

где \$[R\_1]\$ – передаточная матрица блока прямого канала; \$[R\_2]\$ – передаточная матрица блока обратного канала.

Предположив, что матрица  $[E] - [R_1][R_2]$  неособенная, после исключения  $\bar{Z}$  из уравнений (5.46) и (5.47) получают

$$\bar{Y} = ([E] - [R_1][R_2])^{-1}[R_1]\bar{X} = [R_3]\bar{X}, \quad (5.48)$$

где  $[R_3] = ([E] - [R_1][R_2])^{-1}[R_1]$  – передаточная матрица встречно-направленного соединения матричных блоков;  $[E]$  – единичная матрица.

Перейдем теперь к правилам переноса точек суммирования выходов матричных блоков. Рассмотрим МБС, представленную на рис. 5.29, а. Допустим, что точку суммирования выхода матричного блока с передаточной матрицей  $R_3$  (точку  $a$  на рис. 5.29, а) нужно перенести через матричный блок с передаточной матрицей  $R_2$  вперед по направлению прохождения сигналов в точку  $b$  (рис. 5.29, б). Для МБС, представленной на рис. 5.29, а, можно написать

$$\bar{Z} = [R_2]([R_1]\bar{X} + [R_3]\bar{Y}) = [R_2][R_1]\bar{X} + [R_2][R_1]\bar{Y}. \quad (5.49)$$

Аналогично для МБС на рис. 5.29, б.

$$\bar{Z} = [R_2][R_1]\bar{X} + [R_x]\bar{Y}, \quad (5.50)$$

где  $[R_x]$  – искомая передаточная матрица приведенного блока.

Сравнение написанных выше матричных уравнений дает:

$$[R_x] = [R_2][R_3]. \quad (5.51)$$

Отсюда следует правило: для переноса точки суммирования выхода матричного блока вперед по направлению прохождения сигналов в МБС передаточную матрицу приводимого блока следует умножить слева на передаточную матрицу блока, через который осуществляется перенос точки суммирования. Эти же соображения позволяют сформулировать и правило переноса точки суммирования выхода матричного блока против направления прохождения сигналов в МБС (рис. 5.30, а, б). Для переноса точки суммирования выхода матричного блока назад, против направления прохождения сигналов в МБС, передаточную матрицу приводимого блока нужно умножить слева на обратную передаточную матрицу блока, через который осуществляется перенос. Это правило следует из приведенного выше, если им воспользоваться для переноса матричного блока вперед, по направлению прохождения сигналов (рис. 5.29).

Аналогичные правила можно сформулировать и для переноса точек размножения входа матричных блоков. Для переноса точки размножения входа матричного блока вперед по направлению прохождения сигналов в МБС передаточную матрицу приводимого блока следует умножить справа на обратную передаточную матрицу блока, через который осуществляется перенос точки размножения (рис. 5.31, а и б).

Для переноса точки размножения выхода матричного блока против направления прохождения сигналов в МБС передаточную

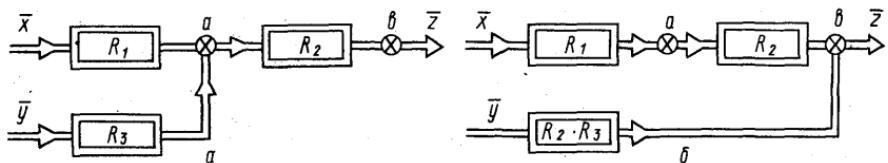


Рис. 5.29. Матричные блок-схемы, поясняющие правила переноса точек суммирования выходов матричных блоков:

*a*—исходная МБС; *б*—преобразованная МБС

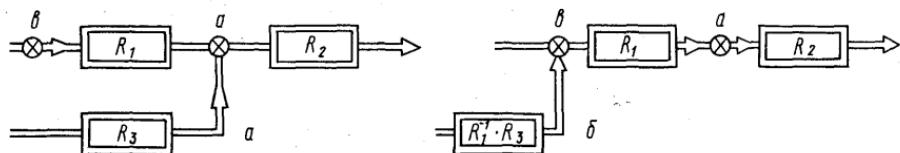


Рис. 5.30. Матричные блок-схемы, поясняющие правило переноса точки суммирования выхода матричного блока против направления прохождения сигналов:

*a*—исходная; *б*—преобразованная

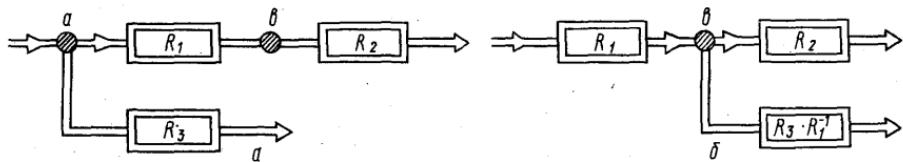


Рис. 5.31. Матричные блок-схемы, поясняющие правило переноса точки размножения входа матричных блоков:

*a*—исходная; *б*—преобразованная

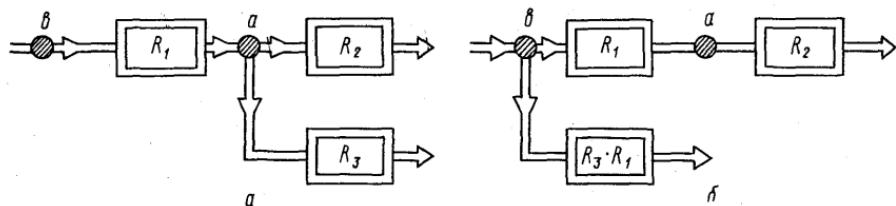


Рис. 5.32. Матричные блок-схемы, поясняющие правило переноса точки размножения выхода матричного блока против прохождения сигналов в МБС:

*a*—исходная; *б*—преобразованная

матрицу приводимого блока следует умножить справа на передаточную матрицу блока, через который осуществляется перенос (рис. 5.32, а и б).

Правила переноса точек суммирования векторов возмущающих и управляющих воздействий аналогичны сформулированным выше правилам переноса точек суммирования выходов матричных блоков. Для переноса точки суммирования возмущающего воздействия вперед по направлению прохождения сигналов в МБС вектор внешнего взаимодействия следует умножить слева на передаточную матрицу блока, через который осуществляется перенос, а для переноса точки суммирования возмущающего воздействия назад, против направления прохождения сигналов в МБС, вектор внешнего воздействия следует умножить слева на обратную матрицу блока, через который осуществляется перенос.

Необходимо отметить, что матричный метод анализа ХТС используется только при линейных характеристиках всех ТО системы. В противном случае необходимо специально оценивать область линеаризации нелинейных характеристик ТО и проводить итерационные процедуры, каждый раз корректируя значения элементов матриц преобразования ТО.

**Пример 5.11.** Для ХТС, матричные блок-схемы которых изображены на рис. 5.33, определить эквивалентные матрицы преобразования.

**Решение.** Для ХТС (рис. 5.33, а) сначала найдем эквивалентную матрицу преобразования для двух параллельно соединенных блоков:  $R^* = R_0 + R_2$ . Теперь

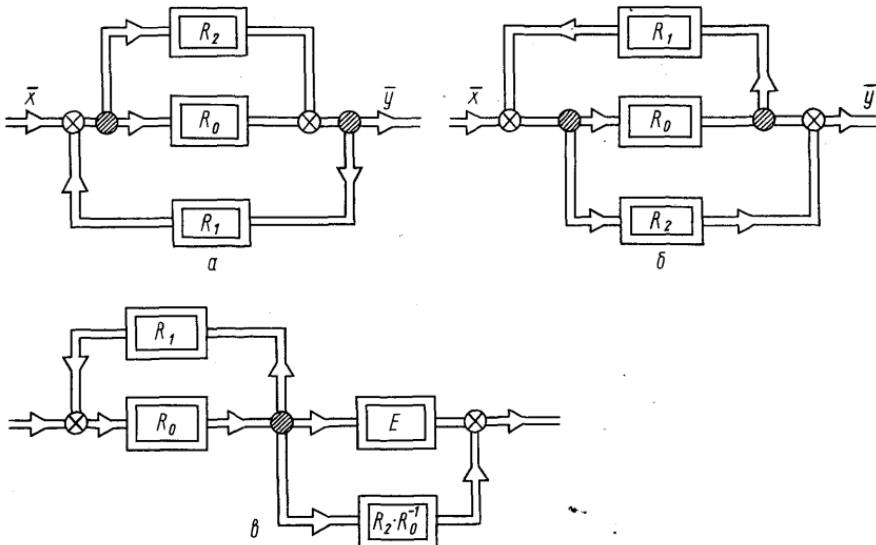


Рис. 5.33. Исходные матричные блок-схемы некоторых ХТС (а, б) и преобразованная от исходной МБС (в)

в соответствии с формулой (5.48) можно записать выражение эквивалентной матрицы преобразования XTC в целом:

$$R_3 = [E - (R_0 + R_2)R_1]^{-1} \cdot (R_0 + R_2).$$

Для XTC (рис. 5.33, б), перенеся точку размножения вектора главного технологического потока через блок с матрицей преобразования  $R_0$ , МБС приводят к виду, изображаемому на рис. 5.33, в. Для МБС (рис. 5.33, в) теперь легко получить выражение эквивалентной матрицы преобразования XTC:  $R_3 = [E + R_2 R_0^{-1}] [E - R_0 R_1]^{-1} R_0$ .

Формализация операций матричного метода анализа XTC, которая базируется на использовании процедур решения СГ с применением УТФ (см. раздел 5.2.3) и правил матричного исчисления, представляет определенные трудности. В связи с этим матричный метод анализа XTC наиболее целесообразно использовать для МБС, содержащих не более трех–четырех контуров. Во всех других случаях для анализа сложных встречнонаправленных XTC применяют блочный и информационный принципы (см. раздел 2.4) с разработкой алгоритмов оптимальной стратегии анализа XTC (см. раздел 2.5 и 2.7).

## 5.5. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

В.5-1. Какие топологические модели (графы) XTC и матрицы, их отображающие, используются для формализованного составления СУ материально-тепловых балансов XTC?

В.5-2. Какая взаимосвязь существует между матрицами инциденций, фундаментальных циклов и отсечений, отображающими МПГ и ТПГ некоторой XTC?

В.5-3. Назовите формализованные и неформализованные операции топологического метода составления СУ материально-тепловых балансов XTC.

В.5-4. Как определяются значения квазивсвободных переменных, которые используются при составлении систем уравнений МТБ?

В.5-5. Назовите две группы задач расчета балансов XTC.

В.5-6. Назовите основные этапы метода непосредственного построения СГ по структурному графу XTC.

В.5-7. Каким образом доказываются правила эквивалентного преобразования СГ?

В.5-8. Поясните сущность операций инверсии прямого пути и контура СГ.

В.5-9. Что такое определитель СГ и минор определителя СГ?

В.5-10. Назовите способы применения универсальной топологической формулы для решения СГ с несколькими вершинами-истоками.

В.5-11. Запишите общее выражение для определения значения коэффициента передачи между двумя промежуточными вершинами СГ с применением УТФ.

В.5-12. Какие матрицы, отображающие СГ, можно использовать для идентификации касающихся (некасающихся) прямых путей и контуров, комбинаций контуров СГ?

В.5-13. Назовите способы определения комбинаций касающихся контуров СГ.

В.5-14. Запишите формулы для расчета значений прямых и косвенных оценок чувствительности XTC.

В.5-15. Запишите дифференциальное уравнение чувствительности XTC.

В.5-16. Запишите формулу для определения логарифмической чувствительности XTC  $S_a''$  на основе анализа сигнальных графов XTC.

В.5-17. Поясните, как влияют истоки и стоки сигнальных графов на логарифмическую чувствительность прямых путей СГ  $S_a^\Sigma$  и на логарифмическую чувствительность определителя СГ  $S_a^A$ .

В.5-18. Каким образом логарифмическая чувствительность XTC  $S_a''$  зависит от изменения параметра  $\alpha$ : ветви СГ, расположенной на прямом пути и входящей в один из контуров СГ; ветви СГ, не принадлежащей прямому пути СГ, но входящей в контур, касающийся одного из прямых путей СГ?

В.5-19. Какими способами можно обеспечить нулевую чувствительность ХТС к изменению некоторого параметра  $\alpha$ ?

В.5-20. Каким образом доказываются правила эквивалентного преобразования матричных блок-схем ХТС?

В.5-21. Какая существует взаимосвязь между сигнальным графом и МБС для некоторой ХТС?

3.5-1. Запишите СУ материальных балансов ХТС опреснения минерализованной артезианской воды (см. пример 2.1) с использованием циклических МПГ.

3.5-2. Составьте СУ материальных балансов по расходам химических компонентов  $A$  и  $R$  для одноконтурной ХТС (см. пример 2.11) с использованием циклических МПГ.

3.5-3. Используя правила матричного исчисления, докажите, что эквивалентная матрица преобразования для одноконтурной МБС (см. рис. 5.28, в) равна:  $[R_3] = [R_1]([E] - [R_2] \times [R_1])^{-1}$ , где  $R$ -несособенная матрица.

3.5-4. Используя правила матричного исчисления, докажите правило переноса точки суммирования выходов матричных блоков против направления прохождения сигналов в МБС (см. рис. 5.30).

3.5-5. Используя правила матричного исчисления, докажите правило переноса точки размножения векторов через матричные блоки вперед и назад по направлению прохождения сигналов в МБС (см. рис. 5.31 и рис. 5.32).

## Глава 6

# ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ АЛГОРИТМЫ ОПТИМИЗАЦИИ СТРАТЕГИИ АНАЛИЗА СЛОЖНЫХ ХТС

## 6.1. АЛГОРИТМЫ ОПТИМИЗАЦИИ СТРАТЕГИИ АНАЛИЗА СЛОЖНЫХ ХТС НА ОСНОВЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКИХ ПОТОКОВЫХ ГРАФОВ

### 6.1.1. Общая характеристика алгоритмов и критерии оптимизации стратегии анализа ХТС

Разработка алгоритмов оптимальной стратегии анализа сложных встречно-направленных ХТС при использовании последовательного технологико-направленного способа базируется на структурном анализе ППГ данной ХТС. Структурный анализ ППГ позволяет выбрать особые дуги ППГ, соответствующие множеству особых разрываемых технологических потоков (см. раздел 2.5). Разрыв особых дуг в структуре исходного много-контурного ППГ данной ХТС превращает этот многоконтурный ППГ в эквивалентный ациклический ППГ, который может быть упорядочен по слоям вершин (см. раздел 4.5.2).

Алгоритм стратегии анализа представляет собой упорядоченный по слоям вершин эквивалентный ациклический ППГ, который при выбранных особых дугах в структуре исходного много-контурного ППГ сложной ХТС устанавливает порядок расчета математических моделей отдельных элементов ХТС, соответствующих вершинам ППГ (см. раздел 2.5).

Задача структурного анализа многоконтурного ППГ, отображающего сложную встречно-направленную ХТС, формулируется

следующим образом. Дан исходный многоконтурный ППГ, который содержит  $l$  разнопараметрических дуг  $Q = (q_1, q_2, \dots, q_l)$  и  $m$  простых контуров  $(L_1, L_2, \dots, L_m)$ .

Необходимо определить в исходном многоконтурном ППГ множество особых дуг  $Q^* = (q_1, q_2, \dots, q_p)$ ,  $Q^* \subset Q$ ,  $|Q^*| = p$ ,  $p \leq m$  с минимальной суммой параметрическостей:

$$n = \sum_{j=1}^p \pi_j = \min, \quad (6.1)$$

которые разрывают все  $m$  простых контуров в исходном ППГ, причем не существует никакого другого подмножества  $\tilde{Q} \subset Q$ ,  $\tilde{Q} \neq Q^*$ , обладающего тем же свойством. Очевидно, что если все дуги исходного ППГ одинаково параметричны, то (6.1) можно записать таким образом:

$$n = p = \min. \quad (6.2)$$

Минимальное множество особых дуг  $Q^*$  – это множество особых дуг, удовлетворяющих условию (6.1).

Алгоритм оптимальной стратегии анализа (алгоритм ОСА) сложной ХТС, отображаемой многоконтурным ППГ, представляет собой такой упорядоченный по слоям вершин эквивалентный ациклический ППГ, который образуется из исходного многоконтурного ППГ в результате разрыва минимального множества особых дуг  $Q^*$ .

Выбор выражений (6.1) и (6.2), равных минимальному порядку системы нелинейных уравнений (2.46), к решению которой сводится вычислительная задача анализа сложных ХТС (см. раздел 2.5), имеет как положительные, так и отрицательные стороны.

Рассмотрим вначале некоторые положительные стороны применения критериев (6.1) и (6.2). Вообще говоря, считается, что при прочих равных условиях чем меньше порядок решаемой СНУ (2.46), тем лучше. Связано это со следующими обстоятельствами:

1) при использовании обобщенного метода секущих, или метода Вольфа для решения СНУ (2.46): чем меньше  $n$ , тем меньше требуется начальных приближений и меньше необходимый объем ОЗУ;

2) при использовании метода Ньютона для решения СНУ (2.46): чем меньше  $n$ , тем меньше необходимый объем ОЗУ и меньше вычислений должно проводиться для определения матрицы частных производных;

3) когда требуется найти все решения СНУ (2.46), иногда прибегают к грубому сканированию для определения примерного расположения корней. Число вычислений в этом случае пропорционально некоторой степени  $n$ . Ясно, что уменьшение  $n$  также может привести к существенному уменьшению числа вычислений;

4) если хорошее начальное приближение для решения СНУ (2.46) неизвестно, то чем меньше порядок системы  $n$ , тем меньше произвола при задании начальных приближений.

Недостатками принятых критериев (6.1) и (6.2) можно считать следующие:

1) эти критерии могут дать такую совокупность особых ТП, что итерационный процесс по параметрам этих ТП будет сходиться плохо или расходиться, в то время как другая совокупность особых ТП могла бы обеспечить лучшую сходимость. Однако все это можно экспериментально проверить только после проведения расчета ХТС для разных совокупностей особых ТП. Задача разработки алгоритмов оптимальной стратегии анализа ХТС состоит в исследовании процедуры расчета ХТС еще до фактического ее расчета на ЭВМ. В условиях, когда ничего не известно об особенностях функционирования ХТС, вряд ли критериям минимума величины  $n$  можно предпочесть какой-либо другой критерий;

2) часто в соответствии с технологией могут быть известны какие-то приближенные значения для переменных некоторых ТП. Если принять эти ТП за особые, то для переменных в этих ТП будут известны хорошие начальные приближения. В то же время, совокупность особых ТП, формально полученная на основе минимизации величины  $n$  (6.1) или (6.2), может дать совсем другие ТП, для которых неизвестны хорошие начальные приближения. Если на основе выбора этих ТП организуется итерационная процедура расчета ХТС, то она не будет иметь хорошего начального приближения; в результате этого сходимость итерационного процесса при расчете ХТС может значительно ухудшиться. При такой ситуации необходимо вводить некоторые дополнительные веса для отдельных ТП, которые будут в какой-то мере отражать уровень технологических знаний о переменных данного ТП. Поскольку точных критериев того, как вводить такие веса, нет, операция ввода дополнительного веса в значительной степени субъективна, однако от ее результатов существенно зависит конечный результат.

Разработка алгоритма оптимальной стратегии анализа химико-технологической системы на основе использования ППГ включает следующие этапы:

✓ 1) разработка алгоритма идентификации одноконтурных подсистем в сложных ХТС;

✓ 2) разработка алгоритма декомпозиции сложной много контурной ХТС на строго соподчиненные элементарные и взаимосвязанные контурные подсистемы, между которыми существуют только односторонние ТП. Элементарные подсистемы ХТС – это отдельные элементы ХТС или одноконтурные подсистемы ХТС. Элементарным подсистемам ХТС в ППГ соответствуют его отдельные вершины. Взаимосвязанным контурным подсистем-

мам ХТС в структуре ППГ соответствуют бикомпоненты, или сильносвязанные компоненты орграфа;

3) разработка алгоритма оптимальной стратегии анализа для каждой из взаимосвязанных контурных строго соподчиненных подсистем ХТС, т. е. разработка алгоритма определения минимального множества особых технологических потоков, для которого выполняется условие (6.1) или условие (6.2) в зависимости от того, имеют ли все ТП системы одинаковую или разную параметричность;

4) разработка алгоритма упорядочения по слоям вершин эквивалентного ациклического ППГ, образовавшегося после выбора минимального множества разрываемых особых ТП.

Разработка алгоритмов идентификации одноконтурных подсистем, алгоритмов декомпозиции сложных ХТС, алгоритмов определения минимального множества особых ТП математически сводится к разработке алгоритмов идентификации или перечисления в структуре ППГ как произвольного орграфа элементарных конфигураций: элементарных путей, элементарных контуров различной длины и различных бикомпонентов. Алгоритмы перечисления в структуре ППГ разнообразных элементарных конфигураций базируются на анализе свойств матрицы смежности орграфа  $[H]$  (см. раздел 4.3).

Приведем некоторые теоремы, отображающие характеристики ППГ и используемые для разработки алгоритмов оптимальной стратегии анализа сложных ХТС.

Теорема 6.1 Дана матрица связей орграфа  $[P_\lambda] = [p_{(\lambda)ij}] = [H]^\lambda = [h_{ij}]^\lambda$ . Если ее элемент  $p_{(\lambda)ij} = 0$ , то в орграфе между вершинами  $i$  и  $j$  не существует элементарного пути длины  $\lambda$ ; если  $p_{(\lambda)ij} = 1$ , то такой путь в орграфе существует.

При образовании матрицы  $[P_\lambda]$  применяют обычные правила перемножения матриц, а каждый элемент  $p_{(\lambda)ij}$  определяют, используя основные операции булевой алгебры, или алгебры логических высказываний. Для операции логического сложения ( $\vee$ ) справедливы следующие соотношения:  $0 \vee 0 = 0$ ;  $0 \vee 1 = 1 \vee 0 = 1$ ;  $1 \vee 1 = 1$ . Для операции логического умножения ( $\wedge$ ) справедливы соотношения:  $0 \wedge 0 = 0$ ;  $0 \wedge 1 = 1 \wedge 0 = 0$ ;  $1 \wedge 1 = 1$ .

Доказательство теоремы осуществляют методом индукции.

Матрица переходов орграфа  $[A_n]$  – это матрица, которая равна логическому объединению матриц  $[P_\lambda]$ , при  $\lambda = 1, n$ :  $[A_n] = \bigcup_{\lambda=1,n} [P_\lambda]$ , где элемент  $a_{(n)ij}$  матрицы  $[A_n]$  показывает, имеется ли  $(a_{(n)ij} = 1)$  или отсутствует  $(a_{(n)ij} = 0)$  в графе путь, длина которого не превышает  $n$ . Из этого утверждения вытекает следующее свойство матриц  $[A_n]$ : если  $n_2 > n_1$  и  $a_{(n_1)ij} = 1$ , то  $a_{(n_2)ij} = 1$ .

Теорема 6.2 Если для некоторого числа  $n'$  матрица переходов  $[A_{n'}] = [A_{n'+1}]$ , то и для всех  $n > n'$   $[A_n] = [A_{n'}] = [A^*]$ , где элементы  $a_{(n')ij}$  матрицы  $[A_{n'}]$  определяют наличие в орграфе

элементарного пути длиной  $n'$  между вершиной  $i$  и вершиной  $j$ . Матрица  $[A^*]$  – это матрица предельных переходов орграфа.

Матрица бикомпонентов орграфа  $[B]$  – это матрица, которая равна логическому пересечению матриц  $[A^*]$  и  $[A^*]^\text{tr}$ :  $[B] = [A^*] \cap [A^*]^\text{tr}$ , где общий элемент определяется соотношением:

$$b_{ij} = a_{(*)ij} \wedge a_{(*)ji} = \begin{cases} 1, & \text{если } a_{(*)ij} = a_{(*)ji} = 1; \\ 0, & \text{если } a_{(*)ij} = 0 \text{ или } a_{(*)ji} = 0. \end{cases}$$

Легко видеть, что если  $b_{ij} = 1$ , то в орграфе имеется как путь  $l_{ij}$ , так и путь  $l_{ji}$  и, следовательно, вершины  $i$  и  $j$  входят в некоторый элементарный контур. Если же  $b_{ij} = 0$ , то в графе отсутствует либо путь  $l_{ij}$ , либо путь  $l_{ji}$  и, следовательно, вершины  $i$  и  $j$  не принадлежат ни одному элементарному контуру графа.

Матрица  $[B]$  позволяет выделить строго соподчиненные бикомпоненты ППГ, т. е. выделить строго соподчиненные взаимосвязанные контурные подсистемы в сложной ХСС. Матрица  $[B]$  имеет следующие свойства, выражаемые теоремами 6.3 и 6.4.

**Теорема 6.3.** Для элементов матрицы  $[B]$  справедливы соотношения: 1°. Если  $b_{ij} = 1$ , то  $b_{ji} = 1$  (симметричность) 2°. Если  $b_{ik} = 1$  и  $b_{kj} = 1$ , то  $b_{ij} = 1$  (транзитивность).

Условия 1° и 2° естественным образом разбивают вершины орграфа на следующие  $Q$  группы:  $K_1, \dots, K_Q$ . Для вершин  $i$  и  $j$ , входящих в одну группу,  $b_{ij} = 1$  (имеются пути  $l_{ij}$  и  $l_{ji}$ ), а для  $i$  и  $j$  из разных групп вершин  $b_{ij} = 0$  (один из путей  $l_{ij}$  или  $l_{ji}$  отсутствует). Группы вершин  $K_l$ , состоящие более чем из одной вершины, и группы, содержащие единичные вершины, входящие в элементарные контуры, являются строго соподчиненными бикомпонентами орграфа.

**Теорема 6.4.** Если для двух вершин орграфа  $i \in K_l, j \in K_k$  ( $l \neq k$ ) и  $a_{ij} = 1$ , то для всех  $i' \in K_l$  и  $j' \in K_k$  величина  $a_{i'j'} = 1$  и при этом  $a_{j'i'} = 0$ .

В самом деле, для двух вершин орграфа  $i'$  и  $j'$  имеется путь  $l_{i'j'} = l_{j'i} + l_{ij} + l_{ji}$ . Последнее утверждение теоремы вытекает из принадлежности  $i'$  и  $j'$  различным строго соподчиненным бикомпонентам.

Теорема позволяет ввести отношение порядка между строго соподчиненными бикомпонентами орграфа:  $K_l > K_k$  (подсистема  $K_l$  предшествует подсистеме  $K_k$ ), если при  $i \in K_l$  и  $j \in K_k$  имеем  $a_{ij} = 1$ , удовлетворяющие обычным условиям, принятым для отношения порядка: 1) для любых  $l$  и  $k$  ( $l \neq k$ ) справедливо не более чем одно из соотношений  $K_l < K_k$  или  $K_l > K_k$ ; 2) если  $K_l < K_k$  и  $K_k < K_s$ , то  $K_l < K_s$ ; 3)  $K_l = K_l$ ; условие  $K_l > K_l$  невозможно.

После идентификации всех  $K_1, \dots, K_Q$  отдельных вершин и бикомпонент, или комплексов в исходном многоконтурном

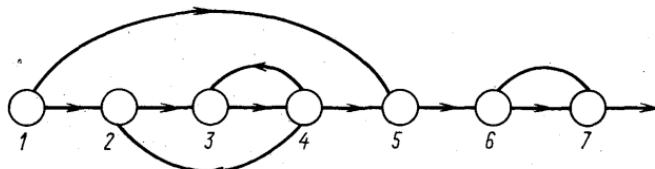


Рис. 6.1. Многоконтурный ППГ некоторой ХТС

ППГ можно построить эквивалентный ациклический ППГ, вершины которого соответствуют как отдельным вершинам, так и комплексам исходного ППГ. Структуру эквивалентного ациклического ППГ можно отобразить, используя матрицу порядка строго соподчиненных вершин  $[K]$  этого орграфа, которая устанавливает отношение порядка отдельных элементов бикомпонент исходного ППГ:

$$[K] = [\tilde{A}^*] \cup [\tilde{B}],$$

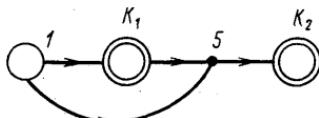
где  $[\tilde{A}^*]$  ( $[\tilde{B}]$ ) – преобразованная матрица  $[A^*]$  ( $[B]$ ), в которой все группы рядов, соответствующих каждой бикомпоненте, или комплексу исходного многоконтурного ППГ заменены одним единичным элементом.

Матрица  $[K]$  – квадратная порядка  $Q$  с общим элементом:

$$k_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } K_i < K_j, \text{ а также при } i = j; \\ 0, & \text{если } K_i \not< K_j. \end{cases}$$

Отношение порядка между строго соподчиненными бикомпонентами орграфа показывает, в какой последовательности должны располагаться бикомпоненты в упорядоченном по слоям вершин орграфе. Если  $K_i < K_j$ , то бикомпонента  $K_i$  должна быть расположена перед бикомпонентой  $K_j$ . Если последовательность бикомпонент  $K_{l_1}, \dots, K_{l_Q}$  такая, что при  $i < j$  величина  $k_{l_i l_j} = 0$ , то эти бикомпоненты орграфа строго упорядочены. Такая строго

Рис. 6.2. Эквивалентный ациклический ППГ, соответствующий исходному многоконтурному ППГ (см. рис. 6.1)



упорядоченная последовательность бикомпонент называется *канонической*. Каноническая, или упорядоченная последовательность бикомпонент исходного ППГ отображается в виде упорядоченного по слоям вершин эквивалентного ациклического ППГ.

**Пример 6.1.** Для многоконтурного ППГ некоторой ХТС (рис. 6.1) на основе использования теорем 6.1–6.4 необходимо: 1) составить матрицу смежности  $[H]$ , матрицы связей  $[P_1]$ – $[P_6]$ , предельную матрицу переходов  $[A^*]$ , матрицу выделения строго соподчиненных бикомпонент, или комплексов  $[B]$ , матрицу порядка строго соподчиненных вершин эквивалентного ациклического ППГ  $[K]$ ; 2) нарисовать упорядоченный эквивалентный ациклический ППГ.

*Решение.* Для исходного ППГ (см. рис. 6.1) матрица смежности  $[H]$  имеет вид:

$$[H] = \begin{matrix} & \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{matrix} \right]. \end{matrix}$$

Составим последовательность матриц (без вершины-истока  $v_1$ ):

$$[P_1] = \begin{matrix} & \begin{matrix} v_2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{matrix} \right]; \end{matrix}$$

$$[P_2] = \begin{matrix} & \begin{matrix} v_2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{matrix} \right]; \end{matrix}$$

$$[P_3] = \begin{matrix} & \begin{matrix} v_2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \end{matrix} \\ \begin{matrix} v_2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{matrix} \right]; \end{matrix}$$

$$[P_4] = \begin{bmatrix} v_2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ v_2 & 0 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix};$$

$$[P_5] = \begin{bmatrix} v_2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ v_2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$[P_6] = \begin{bmatrix} v_2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ v_2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Матрица  $[A^*] = [A_5] = \bigcup_{j=1,5} [P_j] = [A_6] = \bigcup_{i=1,6} [P_i]$  имеет вид:

$$[A^*] = \begin{bmatrix} v_2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ v_2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 4 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}.$$

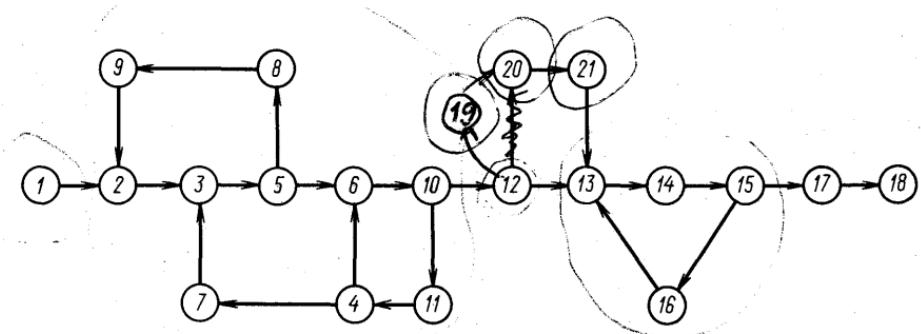


Рис. 6.3. Многоконтурный ППГ некоторой ХТС

Матрица  $[B]$  с учетом вершины  $v_1$  исходного ППГ и матрица строго соподчиненных вершин  $[K]$  эквивалентного ациклического ППГ (рис. 6.2), который совпадает с упорядоченным по слоям вершин орграфом, имеет вид (нулевые элементы опущены):

$$[B] = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 \\ 1 & -1 & & & & & \\ 2 & & 1 & 1 & 1 & & \\ 3 & & 1 & 1 & 1 & & \\ 4 & & 1 & 1 & 1 & & \\ 5 & & & & 1 & & \\ 6 & & & & & 1 & 1 \\ 7 & & & & & 1 & 1 \end{bmatrix};$$

$$[K] = \begin{array}{c|cccc} & v_1 & K_1 & v_5 & K_2 \\ \hline v_1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ K_1 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ v_5 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ K_2 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array},$$

где  $K_1$  – бикомпонента  $(2,3,4,2)$  исходного ППГ;  $K_2$  – бикомпонента  $(6,7,6)$  исходного ППГ.

**Пример 6.2.** Для многоконтурного ППГ некоторой ХТС (рис. 6.3) необходимо: 1) составить матрицу смежности  $[H]$ , предельную матрицу переходов  $[A^*]$ , матрицу выделения строго соподчиненных комплексов  $[B]$  и матрицу порядка строго соподчиненных вершин  $[K]$  эквивалентного ациклического ППГ; 2) построить упорядоченный по слоям вершин эквивалентный ациклический ППГ.

**Решение.** Матрицы  $[H]$  и  $[A^*] = [A_{12}]$  размера  $(21 \times 21)$  имеют вид (нулевые элементы опущены):



	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21
1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	0	все элементы строк и столбцов равны единице						1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
3	0							1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
4	0							1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
5	0							1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
6	0							1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
7	0							1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
8	0							1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
9	0							1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
10	0							1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
11	0							1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
[A*] =		12	0	0	0	0	0	0	0	0	0	①	1	1	1	1	1	1	1	1	1
		13	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0
		14	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0
		15	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0
		16	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0
		17	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	①	1	0	0	0	0
		18	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
		19	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1
		20	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	0	1	1
		21	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	1	1	0	0	1

Матрица выделения строго соподчиненных бикомпонент  $[B]$  размера  $(21 \times 21)$  имеет вид:

где выделены следующие комплексы:  $K_1 = \{1\}$ ,  $K_2 = \{2,3,4,5,6,7,8,9,10,11\}$ ,  $K_3 = \{12\}$ ,  $K_4 = \{13,14,15,16\}$ ,  $K_5 = \{17\}$ ,  $K_6 = \{18\}$ ,  $K_7 = \{19\}$ ,  $K_8 = \{20\}$  и  $K_9 = \{21\}$ . Матрица  $[K]$  размера  $(9 \times 9)$  имеет вид:

$$[K] = \begin{bmatrix} K_1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 \\ K_1 & \textcircled{1} & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & \textcircled{1} & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 3 & 0 & 0 & \textcircled{1} & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 4 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 7 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & \textcircled{1} & 1 \\ 8 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & \textcircled{1} \\ 9 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

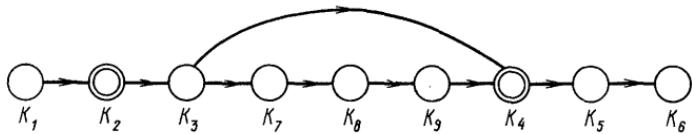


Рис. 6.4. Упорядоченный по слоям вершин эквивалентный ациклический ППГ, соответствующий исходному многоконтурному ППГ (см. рис. 6.3)

Упорядоченный по слоям вершин лэквивалентный ациклический ППГ, соответствующий исходному многоконтурному ППГ (см. рис. 6.3), представлен на рис. 6.4.

### 6.1.2. Алгоритмы идентификации простых контурных подсистем в сложных ХТС

Каждой простой контурной подсистеме ХТС соответствует простой контур ППГ этой системы, который должен быть идентифицирован совокупностью вершин (узлов) и дуг графа. Рассмотрим два алгоритма идентификации простых контуров (ИПК) в ППГ: 1) матричный алгоритм (ИПК-1); 2) многошаговый алгоритм (ИПК-2).

Матричный алгоритм базируется на применении матрицы смежности  $[H]$  и матриц связей  $[P_\lambda]$ , отображающих структуру исходного ППГ. Основные операции матричного алгоритма:

- 1) составление матрицы смежности  $[H]^\lambda$ ;
- 2) составление модифицированной матрицы  $\tilde{H}$ , которая получена из матрицы  $[H]$  в результате исключения рядов, соответствующих вершинам-истокам и стокам ППГ;
- 3) определение матрицы связей  $[P_\lambda] = [\tilde{H}]$  при  $\lambda \geq 2$ ;
- 4) проверка наличия элементов  $p_{(\lambda)ii} = 1$ . Запись номера вершин, входящих в элементарные контуры длины  $\lambda$ ;
- 5) объединение в матрице  $\tilde{H}$  всех вершин, входящих в каждый элементарный контур длины  $\lambda$ , в один комплексный узел, или псевдоузел;
- 6) повторение операции п. 1 при  $\lambda = 2$ .

Алгоритм прекращает работу, когда в результате образования очередного комплексного узла остается в модифицированной матрице  $\tilde{H}_{(\lambda)}$  одна псевдовершина, или когда  $p_{(\lambda)jj} = 0$ .

На второй операции рассчитывается величина:  $b = \sum_{i=1}^v p_{(\lambda)ii}$ , где  $v$  – общее число вершин ППГ, и рассматриваются четыре случая: 1) если  $b = 0$ , то в ППГ нет контура длины  $\lambda$ ; 2) если  $b = \lambda$ , то найден один контур, элементами которого являются вершины  $i$ , для которых  $p_{(\lambda)ii} = 1$ ; 3) если  $(b > \lambda) \wedge (p_{(\lambda)ii} \leq 1)$  для любого  $i$ , то найдены  $b/\lambda$  независимых простых контуров; 4) если  $(b > \lambda) \wedge (p_{(\lambda)kk} = 1)$ , то найдены  $b/\lambda$  контуров, из которых  $p_{(\lambda)kk}$  содержит вершину  $k$ .

Для случаев 3) и 4) необходимо выделить простые контуры в ППГ, что можно сделать, обращаясь к матрице связи  $[C]$ , в которой учитываются, за исключением одной, все дуги между вершинами – элементами контура длины  $\lambda$ . После возведения матрицы  $[C]$  в степень  $\lambda$  сравниваются диагональные элементы  $[P_\lambda]$  и  $[C^*]$ . Поскольку в  $[C]$  входят только вершины, которые являются элементами контуров длины  $\lambda$ , и одна дуга между ними отсутствует, некоторые  $c_{ii}^{(\lambda)}$  должны быть меньше  $p_{(\lambda)ii}$ .

Когда число этих диагональных элементов матрицы  $[C]$  равно  $\lambda$ , соответствующие вершины входят в один контур и должны быть удалены из  $[C]$ . Если после этого в  $[C]$  осталось более  $\lambda$  вершин, из матрицы удаляется одна дуга и вся процедура повторяется. Когда более  $\lambda$  элементов  $c_{ii}^{(\lambda)} < p_{(\lambda)ii}$ , соответствующие вершины принадлежат нескольким связанным между собой контурам, для которых необходимо осуществить процедуру разделения. Таким образом, для разделения  $N$  контуров длиной  $\lambda$  требуется, по крайней мере,  $(N - 1)$  обращений к матрице  $[C]$ .

Этот алгоритм выделяет одновременно контуры и комплексы, но его программная реализация сложна в связи с образованием псевдовершины, необходимостью разделения контуров и корректировки контуров, включающих псевдовершину. Указанный алгоритм в ряде случаев не позволяет выделить все контуры в любом графе. Полный граф с тремя вершинами имеет пять циклов 121, 232, 313, 1231 и 1321. Матрицы связи  $P_2$  имеют диагональные элементы  $p_{(2)11} = p_{(2)22} = p_{(2)33} = 1$ , т. е. каждая из вершин графа является элементом контуров с двумя дугами. На третьем шаге работы алгоритма вершины, входящие в контуры, объединяются в одну псевдовершину. После этого алгоритм прекращает работу, потому что остается только одна вершина, и контуры 1231 и 1321 не будут выделены. Матричный алгоритм требует много счетного времени и большой объем памяти.

Многошаговый алгоритм базируется на построении по модифицированной матрице смежности  $[\tilde{H}]$ , из которой удалены ряды, соответствующие истокам и стокам ППГ, прадерева с корнем, отображающего все пути в ППГ длиной  $\lambda$ . Вершина – корень прадерева – это вершина-исток, имеющая выходную степень  $\rho_{\text{вых}} = 1$ . Любая промежуточная вершина прадерева имеет следующие степени:  $\rho_{\text{вх}} = 1$ ,  $\rho_{\text{вых}} > 1$ . Висячие вершины прадерева – это вершины-стоки, имеющие  $\rho_{\text{вх}} = 1$ . Рассмотрим сущность многошагового алгоритма идентификации простых контуров длины  $\lambda \geq v$ , где  $v$  – число вершин ППГ, представляющего собой бикомпоненту. В данном ППГ необходимо выбрать вершину, которая будет являться вершиной-корнем прадерева.

Промежуточные вершины ППГ, имеющие  $\rho_{\text{вх}} = \rho_{\text{вых}} = 1$ , в качестве корней прадерева не выбираются. Пусть  $k$  – вершина-корень, тогда наличие в матрице  $[\tilde{H}]$  элементов  $h_{km} = h_{ml} = h_{ls} = 1$

отображает существование в ППГ и в прадереве пути, проходящего через вершины  $k$ ,  $m$ ,  $l$  и  $s$ .

Для каждой вершины  $j$  ( $j = 1, v$ ) ППГ выявляют все вершины-потомки, определяя в каждом  $i$ -м столбце ( $i = 1, v$ )  $j$ -й строки матрицы  $[\tilde{H}]$  элементы  $h_{ji} = 1$ . Затем аналогично  $j$ -й вершине для  $i$ -й вершины определяют ее вершины-потомки и т. д. Далее эти найденные вершины-потомки соединяют дугами в прадереве, последовательности которых соответствуют всем возможным путям в ППГ.

При построении прадерева с корнем могут появляться висячие вершины. Висячей вершиной прадерева является такая вершина, номер которой совпадает с номером одной из вершин, принадлежащей любому пути прадерева. Очевидно, что каждая висячая вершина прадерева принадлежит элементарному контуру ППГ.

Общее число висячих вершин прадерева всегда больше числа простых контуров ППГ, так как разные висячие вершины прадерева могут соответствовать одному и тому же простому контуру.

После определения по прадереву с корнем простых контуров составляют матрицу элементарных контуров ППГ  $[\Omega]$ , общий элемент которой равен:

$$l_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если } j\text{-я дуга входит в } i\text{-й элементарный контур;} \\ 0, & \text{в противном случае.} \end{cases}$$

Алгоритм построения прадеревьев состоит из следующих операций:

1) проверка длины каждого пути прадерева  $\lambda$ ; эта длина должна быть равна длине простого контура ППГ. Если из вершины корня  $k$  прадерева начинается путь с числом вершин  $\lambda$ , то определяется дуга, соединяющая последнюю висячую вершину этого пути с корнем. Нахождение такой дуги фиксирует наличие контура размерности  $\lambda$ . В противном случае данная вершина прадерева не принадлежит простому контуру;

2) проверка для каждого пути прадерева длиной меньше  $\lambda$  совпадения вершин. Если вершины совпали, то делается шаг назад, в предыдущую вершину пути прадерева. Построение прадерева продолжается по новой ветви, выходящей из этой вершины;

3) проверка перехода к вершине, не принадлежащей данной бикомпоненте ППГ. Если такой переход произошел, то возвращаются в предыдущую вершину и продолжают построение прадерева в новом направлении.

Пример 6.3. Определить, используя многошаговый алгоритм, простые контуры для ППГ (рис. 6.5, а) химико-технологической системы двухпоточной МЭАО синтез-газа в производстве аммиака (см. пример 5.2).

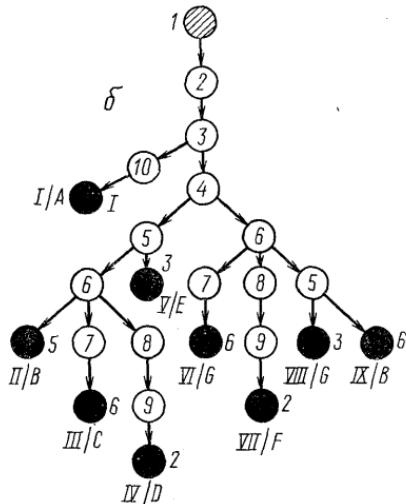
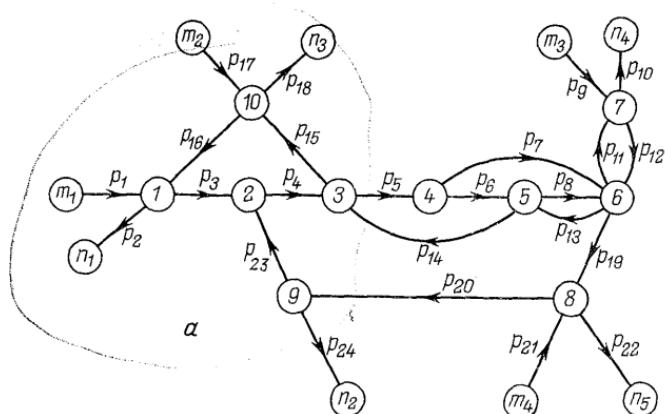


Рис. 6.5. Параметрический потоковый граф ХТС двухпоточной моноэтаноламиновой очистки синтез-газа от оксида углерода (а) и прадерево (б) с корнем для выделения элементарных контуров графа

*Решение.* В качестве корня прадерева (рис. 6.5, б) выбирают вершину 1 исходного ППГ (рис. 6.5, а). Строят матрицу  $[H]$  исходного ППГ.

$$[H] = \begin{bmatrix} 1 & 10 & 7 & 8 & 9 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 10 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 7 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 8 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 9 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 6 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Таблица 6.1. Результаты идентификации простых контуров (см. рис. 6.5)

Висячая вер-Вершины ППГ, входящие в шиниа праде- простой контур	Простой контур ППГ	Висячая вер-Вершины ППГ, входящие в шиниа праде- простой контур	Простой контур ППГ
I	1-2-3-10-1	A	VI
II	5-6-5	B	2-3-4-6-8-9-2
III	6-7-6	C	3-4-6-5-3
IV	2-3-4-5-6-8-9-2	D	IX
V	3-4-5-3	E	6-5-6

Наличие в  $[H]$  элементов  $h_{12} = h_{23} = h_{310} = 1$  отражает существование в ППГ (рис. 6.5, а) и в прадереве (рис. 6.5, б) пути, проходящего через вершины 1,2,3 и 10. Для каждой вершины  $j$  ( $j = 1, 2, \dots, 10$ ) ППГ выявляют все вершины-потомки, отыскивая в каждом  $i$ -ом столбце ( $i = 1, 2, \dots, 10$ )  $j$ -й строки матрицы  $[H]$  элементы  $h_{ij} = 1$ . Затем таким же образом отыскивают для каждой вершины  $i$  ППГ ее вершины-потомки и т. д.

Найденные для каждой вершины  $i$  ППГ ее вершины-потомки соединяют дугой в прадереве (рис. 6.5, б) и таким образом определяют все пути в ППГ. Прадерево (рис. 6.5, б) позволяет выявить простые контуры в исходном ППГ (табл. 6.1).

Алгоритм ИПК-III базируется на анализе свойств матрицы инциденций  $[S]$  орграфа, которые сформулированы в виде теоремы IV-4 о нулевых значениях определителей подматриц матрицы  $[S]$ .

Сравним эффективность некоторых алгоритмов ИПК. Алгоритм ИПК-І имеет весьма ограниченную работоспособность, когда орграф содержит различные контуры одинаковой длины. Это обусловлено тем, что  $[P_\lambda]$ , диагональ которой заполнена элементами  $p_{(\lambda)ii} = 1$  можно поставить в соответствие  $t = c_\lambda^2$  типов орграфов. Алгоритм – ИПК-ІІ универсален, однако его применение для бикомпонент орграфов с большим числом вершин является весьма трудоемким, так как размер матриц  $[H]$  растет пропорционально  $v^2$ , где  $v$  – число вершин орграфа, и образуется множество дублирующих вариантов идентификации одних и тех же контуров.

Алгоритмы идентификации простых контуров в ППГ формализуют важнейшие процедуры, формирующие массивы исходной информации для алгоритма оптимизации стратегии анализа (ОСА) многоконтурных ХТС (см. раздел 6.1.3) и алгоритма декомпозиции сложных ХТС на строго соподчиненные подсистемы (см. раздел 6.1.4).

### 6.1.3. Алгоритмы оптимизации стратегии анализа сложных многоконтурных ХТС

Рассмотрим алгоритмы оптимизации стратегии анализа (ОСА) сложных многоконтурных ХТС при одинаковой и различной параметричности всех ТП системы, которые позволяют опреде-

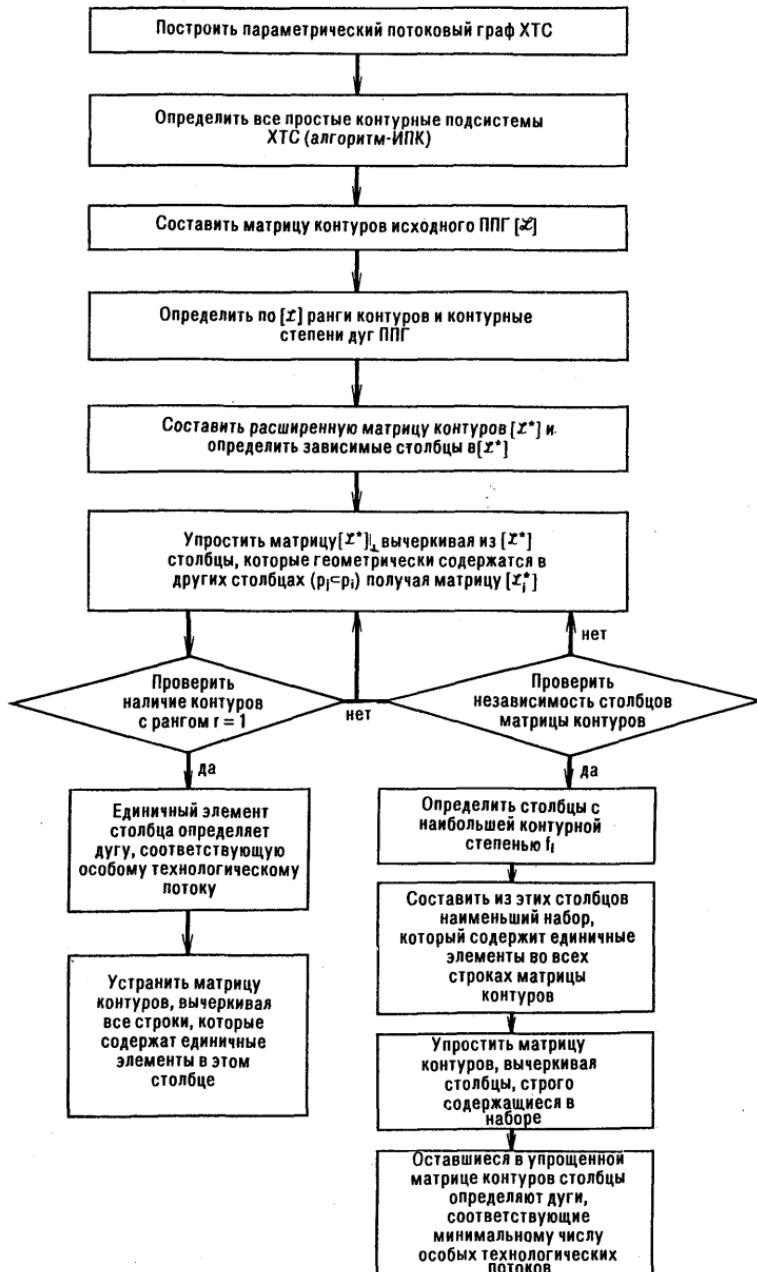


Рис. 6.6. Блок-схема алгоритма оптимальной стратегии анализа многоконтурных ХТС при одинаковой параметричности всех технологических потоков (алгоритм ОСА-1)

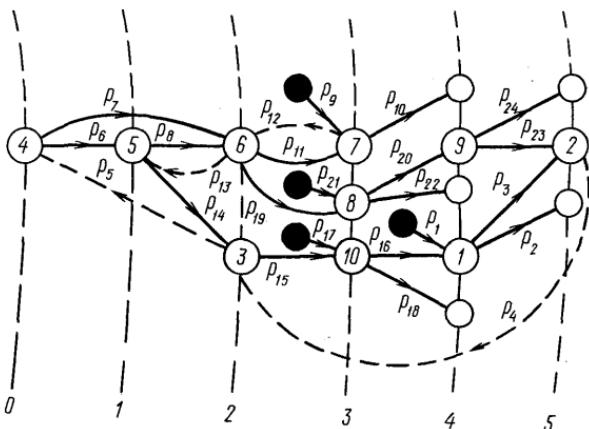


Рис. 6.7. Упорядоченный по слоям вершин эквивалентный ациклический параметрический потоковый граф XTC:

затушеванные узлы соответствуют свободным информационным переменным

лиять минимальное множество особых разрываемых ТП по критериям (6.1) и (6.2).

Алгоритм ОСА многоконтурных ХТС при одинаковой параметричности всех ТП (алгоритм ОСА-І), блок-схема которого изображена на рис. 6.6, основан на рассмотрении расширенной матрицы контуров  $[\Omega^*]$  ППГ. Матрица  $[\Omega^*]$  – это матрица простых контуров  $[\Omega]$  ППГ, дополненная строкой контурных степеней дуг и столбцом рангов простых контуров графа. Ранг контура  $\Pi_{\text{ППГ}} r$  равен числу дуг, входящих в контур. Контурная степень дуги  $f_r$  – равна числу контуров, в которые данная дуга входит.

Если степень  $f_i$  дуги  $p_i$  больше, чем степень  $f_j$  дуги  $p_j$  ППГ (или  $f_i = f_j$ ), и если  $p_j$  входит только лишь в те контуры графа, которые включают  $p_i$ , то дуга  $p_j$  геометрически содержитя в дуге  $p_i$ , или  $p_i$  геометрически содержит  $p_j$  ( $p_j \subset p_i$ ). Очевидно, что выбор в качестве дуги, соответствующей особому ТП, дуги  $p_i$  приведет к разрыву большего числа контуров в ППГ и к получению СНУ (2.45) меньшего порядка (2.46) при расчете ХТС, чем выбор дуги  $p_j$ . Если  $p_i$  геометрически содержитя в  $p_j$ , то столбцы  $p_j$  и  $p_i$  матрицы  $[\Omega^*]$  зависмы. Исключение из  $[\Omega^*]$  столбца  $p_j$  не влияет на определение минимального числа дуг ППГ, соответствующих особым ТП (6.2). Блок-схема алгоритма ОСА-1 представлена на рис. 6.6.

Пример 6.4. Необходимо определить минимальное множество особых разрываемых дуг по критерию (6.2) для многоконтурного ППГ (см. рис. 6.5, а) ХТС двухпоточной МЭАО.

Решение. Матрица  $[\Omega^*]$  ППГ, дополненная столбцом  $r$  и строкой  $f$ , имеет вид:

Вычеркивая из матрицы  $[\Omega^*]$  столбцы  $p_6$ ,  $p_7$ ,  $p_{11}$ ,  $p_{19}$ ,  $p_{20}$  и  $p_{23}$ , геометрически содержащиеся в столбцах  $p_4$ ,  $p_5$  и  $p_{12}$ , получают упрощенную матрицу  $[\Omega_1^*]$ :

	$p_4$	$p_5$	$p_9$	$p_{12}$	$p_{13}$	$r$
A	1	0	0	0	0	1
B	0	0	1	0	1	2
C	0	0	0	1	0	1
D	1	1	1	0	0	3
E	0	1	0	0	0	1
F	1	1	0	0	0	3
G	0	1	0	0	1	2
f	3	4	2	1	2	0

Так как в матрице  $[\mathfrak{L}^*]$  все столбцы независимы и имеют строки, содержащие только по одному элементу  $l_{11} = l_{34} = l_{52} = 1$ , то  $p_4$ ,  $p_5$  и  $p_{12}$  выбирают как дуги, соответствующие особым ТП. Преобразуя матрицу  $[\mathfrak{L}_1^*]$  получают новую упрощенную матрицу  $[\mathfrak{L}_2^*]$ :

$$[\mathcal{L}_2^*] = \frac{B}{f} \begin{bmatrix} p_8 & p_{13} & | & r \\ \hline 1 & 1 & - & 2 \\ 1 & 1 & - & 0 \end{bmatrix},$$

и в качестве дуги, соответствующей особому ТП, выбирают  $p_{13}$ .

Упорядоченный по слоям вершин эквивалентный ациклический ППГ данной ХТС полученный при разрыве в исходном ППГ (см. рис. 6.5, a) особых дуг  $p_4$ ,  $p_5$ ,  $p_{12}$  и  $p_{13}$ , представлен на рис. 6.7.

Блок-схема интерактивного (диалогового) алгоритма ОСА многоконтурных ХТС с различной параметричностью ТП (алгоритма ОСА-II), изображена на рис. 6.8.

В алгоритме ОСА-II рассматриваются новую расширенную матрицу  $[\Omega^{**}]$ , которая представляет собой матрицу  $[\Omega^*]$ , до-

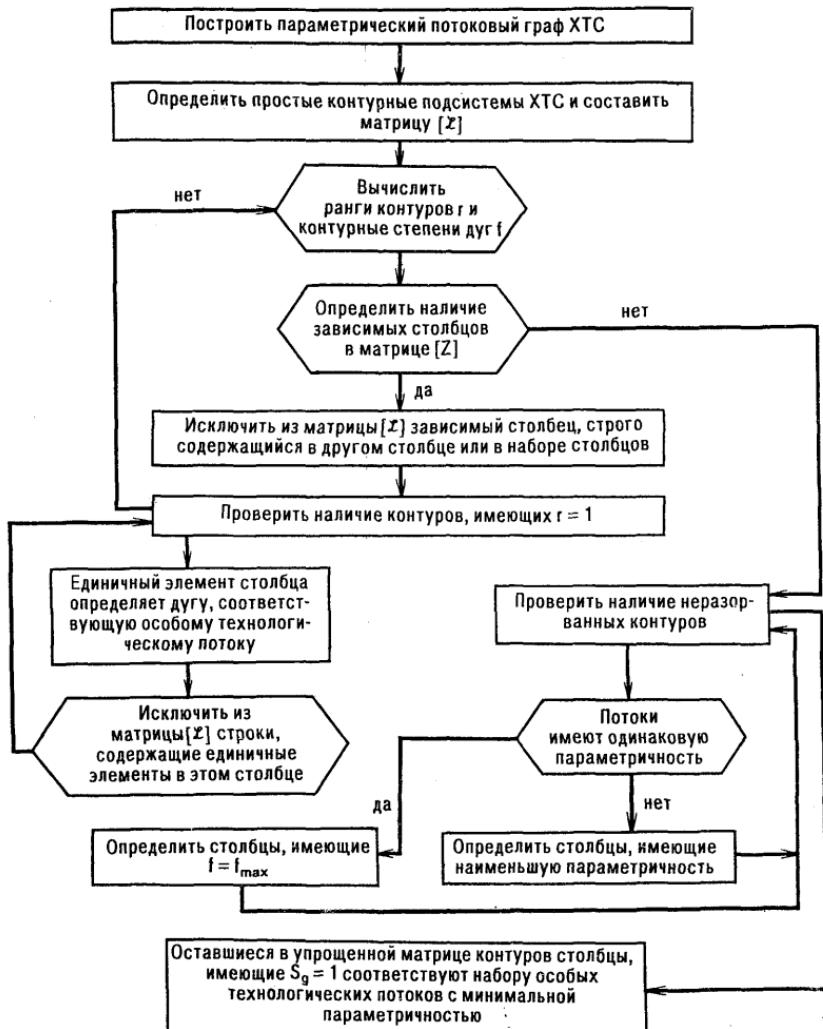


Рис. 6.8. Блок-схема алгоритма оптимальной стратегии анализа функционирования замкнутых подсистем при различной параметричности технологических потоков (алгоритм ОСА-II)

полненную строками параметричностей  $\pi$  и статусов дуг  $s_g$  и столбцом статусов простых контуров  $s_k$ .

Вводят понятие избыточной дуги ППГ. Избыточной дугой ППГ – это такая дуга  $p_j$ , для которой  $p_j \subset p_i$  и  $\pi_j > \pi_i$ , причем  $\Omega_n = (p_j, p_i, \dots, p_n)$ . Если в качестве особой дуги ППГ выбрать  $p_j$ , то потребуется отыскать еще дополнительную дугу, которая позволила бы разомкнуть контур  $\Omega_n = (p_j, p_i, \dots, p_n)$ . При этом

намного возросло бы и общее число переменных, по которым необходимо проводить итерации, по сравнению со случаем, когда в качестве особой дуги ППГ была выбрана только  $p_i$ . Если  $p_j$  – избыточная дуга ППГ, для которой  $p_j \subset p_i$ , то столбец  $p_j$  называют *минором столбца  $p_i$* .

Если в матрице  $[\Omega^{**}]$  столбец  $k$  (или набор столбцов  $1, m, \dots$ ) геометрически содержит столбец  $j$  и если  $\pi_k \leq \pi_j$  или  $(\pi_1 + \dots + \pi_m + \dots) \leq \pi_j$ , то столбец  $k$  (или набор столбцов  $1, m, \dots$ ) называется *строго содержащим столбец  $j$* . Здесь можно отметить, что дуги и (или) наборы дуг ППГ могут геометрически и строго содержать друг друга.

Все операции алгоритма осуществляются без изменения двоичных элементов  $[\Omega^{**}]$ , а только при помощи записи соответствующей информации в ряды статусов  $s_g$  и  $s_k$  каждой строки и столбца.

Дуги ППГ могут находиться в одном из четырех состояний, которые отображаются величиной статуса дуги ППГ: предпочтительные  $s_g = 2$ ; итерационные  $s_g = -1$ ; избыточные  $s_g = 0$ ; текущие  $s_g = 1$ . Контуры имеют только два состояния, которые отображаются величиной статуса контуров: расчлененные (разорванные)  $s_k = 0$ ; нерасчлененные  $s_k = 1$ . Когда все контуры оказались разорванными, алгоритм ОСА-II заканчивает работу. При использовании алгоритма ОСА-II первоначально устанавливают, что все дуги (ТП) являются *текущими*, однако в результате дополнительного анализа некоторые из них могут оказаться *предпочтительными*.

Рассмотрим специальную операцию для того случая, когда в процессе анализа  $[\Omega^{**}]$  сталкиваются с предпочтительными дугами (ТП), которые предпочтительно указывает инженер-технолог. Предпочтительные дуги (ТП) обычно относятся к одному из трех указанных ниже классов:

1) ТП, который в любом случае стал бы итерационным. Естественно, что тогда не требуется проведения никакой специальной операции;

2) ТП, который соответствует дуге ППГ и представляет собой минор другой предпочтительной дуги. Тогда просто исключается минор, но в отличие от случая исключения простой дуги фиксируется информация о вычеркивании;

3) текущий ТП, соответствующий дуге ППГ, которая строго содержит предпочтительную дугу. Решение относительно того, что следует делать в этом случае, произвольно. Простейшее действие заключалось бы в пренебрежении статусом предпочтения дуги и удалении предпочтительной дуги обычным образом. Однако вместо этого делаются попытки отыскать другую дугу или дуги, которые совместно с предпочтительной дугой геометрически содержат первоначальную текущую дугу, а поэтому

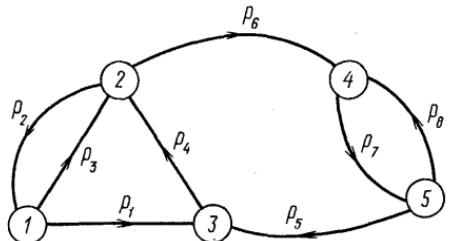


Рис. 6.9. Параметрический потоковый граф, представляющий собой бикомпоненту с разнопараметрическими дугами

могут ее заменить. В зависимости от характера задачи возможно отыскать такой набор дуг, однако стоимость цифровых расчетов при повышенном числе задаваемых переменных может оказаться очень высокой.

Чтобы упорядочить поиск возможного заменяющего набора дуг, необходимо ввести некоторую граничную оценку: насколько может быть превышена численная величина  $\pi_j$  первоначальной дуги (ТП). Предлагаемое условие можно выразить в виде неравенства:  $c \leq c_{\min}(1 + \alpha)$ , где  $c$  – сумма значений  $\pi_j$  в наборе дуг, а  $c_{\min}$  – число, связанное с первоначальной текущей дугой (ТП). Произвольный параметр  $\alpha > 0$ , его величина задается до того, как приступают к анализу. Все наборы дуг, геометрически содержащие первоначальную дугу и удовлетворяющие этому неравенству, выписывают совместно с указанием дополнительных вычислений, связанных с задаваемыми переменными. Если инженер все-таки выбирает первоначальную дугу, то все ее миноры, включая предпочтительную дугу (дуги), удаляют из  $[\Omega^{**}]$  обычным путем. Если инженер остановит свой выбор на любой из предложенных ему комбинаций дуг, то будет исключена первоначальная текущая дуга.

Поясним сущность основных операций интерактивного алгоритма ОСА-II (см. рис. 6.8) на примере определения минимального множества особых дуг по критерию (6.1) для ППГ, представляющего собой бикомпоненту с разнопараметрическими дугами (рис. 6.9). Расширенная матрица  $[\Omega^{**}]$  для этой бикомпоненты, содержащей четыре контура  $\Omega_1 - \Omega_4$ , имеет вид:

	$p_1$	$p_2$	$p_3$	$p_4$	$p_5$	$p_6$	$p_7$	$p_8$	$r$	$s_k$
$\Omega_1$	0	1	1	0	0	0	0	0	2	1
$\Omega_2$	0	0	0	0	0	0	1	1	2	1
$\Omega_3$	1	1	0	1	0	0	0	0	3	1
$[\Omega^{**}] = \Omega_4$	0	0	0	1	1	1	1	0	4	1
$f$	1	2	1	2	1	1	2	1	0	0
$\pi$	1	3	4	4	4	4	4	4	0	0
$s_g$	1	1	1	1	1	1	1	1	0	0

Нетрудно видеть, что  $p_3 \subset p_2$ . Помимо этого  $\pi_3 < \pi_2$ . Таким образом, если бы в качестве исходной особой дуги была избрана дуга  $p_3$ , то потребовалось бы отыскать дополнительную дугу, которая разорвет контур  $\Omega_3$ . Одновременно возрастет число итерируемых переменных ТП по сравнению со случаем выбора только  $p_2$ . Следовательно,  $p_3$  можно исключить из дальнейшего рассмотрения, т. е.  $p_3$  – это избыточная дуга, которая является *минором*  $p_2$ . Этот столбец  $p_3$  может быть вычеркнут, а его статус установлен равным нулю. В результате этого строка  $\Omega_1$  будет иметь новый ранг контура,  $r = 1$ , т. е. ранг контура  $\Omega_1$  становится равным 1. Это в свою очередь указывает на то, что  $\Omega_1$  может быть разорван только в том случае, если в качестве итерируемой будет выбрана дуга, содержащая оставшийся ненулевой элемент  $p_2$ . Если величине  $p_2$  должна быть принята за итерируемую, то любой контур, который проходит по  $p_2$ , будет разорван, а его статус должен стать равным нулю.

Рассмотрим различные варианты выбора предпочтительных дуг ППГ. В качестве предпочтительной дуги можно задать  $p_2$ . Однако можно выбрать другую предпочтительную дугу  $p_3''$ , которая является минором  $p_2$ . Минор  $p_3''$  может быть просто вычеркнут с фиксацией информации.

Рассмотрим случай, когда предпочтительной дугой является только  $p_3$ . Как уже отмечалось выше,  $p_3''$  представляет собой минор  $p_2$ , однако вместо того, чтобы вычеркнуть  $p_3''$ , отмечают, что сочетание  $p_3''$  и  $p_1$  геометрически содержит  $p_2$ , сумма их  $\pi_j$  составляет 5, эта величина для  $p_2$  равна 3. Аналогичным образом  $p_2 \subset (p_3'' \text{ и } p_4)$ , но их сумма параметричностей дуг  $p_3''$  и  $p_4$  равна 8.

#### 6.1.4. Алгоритм декомпозиции сложных встречно-направленных ХТС

Этот алгоритм, осуществляющий декомпозицию ХТС на строго соподчиненные подсистемы включает как составные операции алгоритм ИПК и алгоритм выделения бикомпонент в орграфе. Блок-схема алгоритма декомпозиции сложных ХТС (алгоритм ДСС) на строго соподчиненные элементарные и многоконтурные (бикомпоненты) подсистемы представлена на рис. 6.10.

Алгоритм упорядочения слоев вершин (УСВ) эквивалентного ациклического ННГ, представляющий собой алгоритм образования канонической последовательности выделенных бикомпонент исходного многоконтурного ННГ, включает следующие операции:

- 1) определение по матрице  $[\Omega]$  вершины-истока в эквивалентном ациклическом ППГ, которой в матрице  $[\Omega]$  соответствует столбец, содержащий единственный ненулевой элемент  $l_{ii} = 1$ ;
- 2) вычеркивание из  $[\Omega]$  строки и столбца, соответствующих этой вершине-стоке;
- 3) повторение операций 1 и 2;
- 4) построение упорядоченного по слоям вершин эквивалентного ациклического ППГ, в котором расположение вершин по слоям соответствует порядку вычеркивания рядов в матрице  $[\Omega]$ .

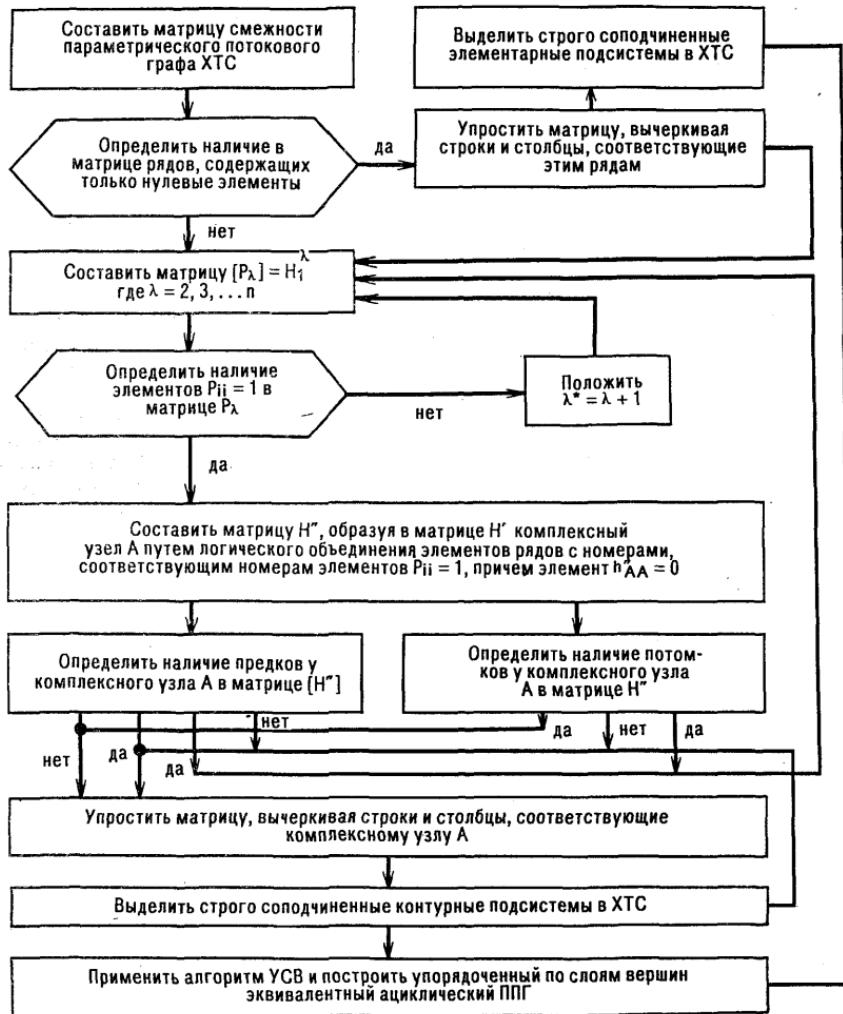


Рис. 6.10. Алгоритм декомпозиции сложных XTC на строго соподчиненные элементарные и многоконтурные подсистемы

## 6.2. АЛГОРИТМЫ ОПТИМИЗАЦИИ СТРАТЕГИИ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ ХТС С ПРИМЕНЕНИЕМ ИНФОРМАЦИОННО-ПОТОКОВЫХ ГРАФОВ

### 6.2.1. Алгоритм оптимизации стратегии решения совместно разомкнутых СУ (алгоритм ОСР-І)

Алгоритм оптимизации стратегии решения совместно разомкнутых СУ (алгоритм ОСР-І) – это алгоритм оптимального выбора набора свободных и выходных информационных пере-

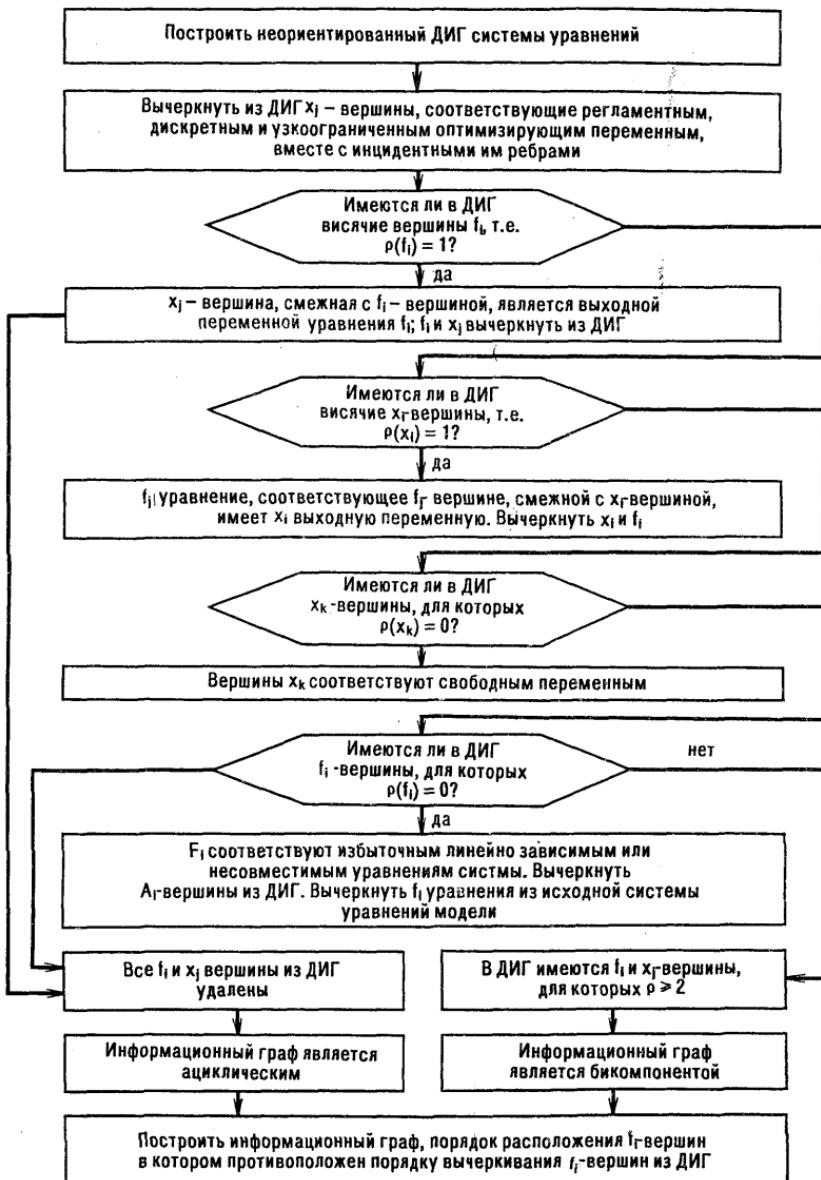


Рис. 6.11. Блок-схема алгоритма выбора свободных переменных системы уравнений, обеспечивающего ациклическую структуру информационного графа (ОСР-І)

менных СУ (см. раздел 3.2), который в результате анализа структуры исходного неориентированного ДИГ обеспечивает оптимальную смежность вершин в ориентированном ДИГ (см. разделы 4.5.1 и 4.5.2) и выделение в нем бикомпонент.

Основной критерий оптимального выбора СВИП и выходных ИП, обеспечивающих ацикличность ИГ соответствующей системы уравнений, состоит в том, что в исходном неориентированном ДИГ должен существовать, по крайней мере, один  $x_i$ -узел со степенью  $\rho(x_i) = 1$  и один  $f_i$ -узел со степенью  $\rho(f_i) = 1$ . Это понятно, так как каждый направленный путь в ориентированном ДИГ, соответствующем ациклическому ИГ, должен оканчиваться в узле  $x_i$ . Если узлы  $x_i$  и  $f_1$ , имеющие каждый степень  $\rho = 1$ , удалить из исходного ДИГ в соответствии с правилами преобразования ДИГ (см. раздел 4.5.1), то вновь полученный ДИГ как подграф исходного неориентированного ДИГ опять не должен содержать циклов, т. е. в этом подграфе должен также существовать, по крайней мере, один  $x_k$ -узел и один  $f_n$ -узел, имеющие каждый степень  $\rho = 1$ .

Блок-схема алгоритма ОСР-І, позволяющего получить ациклическую структуру ИГ, представлена на рис. 6.11. Оставшиеся в результате преобразования исходного ДИГ по алгоритму ОСР-І  $x_m$ -узлы, имеющие  $\rho(x_m) = 0$ , соответствуют оптимальному набору СВИП.

Если в результате преобразований исходного ДИГ по алгоритму ОСР-І получают  $f_k$ -узлы, имеющие  $\rho(f_k) = 0$ , то, следовательно, в исходной СУ имеются избыточные линейнозависимые или несовместные  $f_k$ -уравнения, которые из СУ необходимо исключить.

Порядок расположения  $f$ -узлов в ИГ противоположен порядку вычерчивания этих узлов из соответствующего неориентированного ДИГ. Если в результате преобразований исходного ДИГ по алгоритму ОСР-І вычерчиваются не все  $f$ -узлы, то, следовательно, в ИГ системы уравнений имеются замкнутые контуры, и данный набор СВИП обусловливает необходимость решения совместно замкнутой СУ (см. раздел 3.2), которой соответствует бикомпонента в ДИГ (см. раздел 4.5). Очевидно, что применение алгоритма ОСР-І связано с выполнением ряда интерактивных процедур, обеспечивающих выполнение основных рекомендаций по рациональному выбору СВИП в соответствии с технологическими и физико-химическими условиями (см. раздел 2.10).

Пример 6.5. Применить для оптимального выбора набора СВИП системы уравнений материального баланса ХТС, операторная схема которой представлена на рис. 6.12, а (алгоритм ОСР-І; построить ИГ для СУ).

*Решение.* Система уравнений материального баланса ХТС имеет следующий вид:

уравнения баланса ОМР для технологических потоков

$$f_1: q_1 + q_5 - q_2 = 0; \quad q_1 = q_2 - q_5;$$

$$f_2: q_2 - q_3 = 0; \quad q_3 = q_2;$$

$$f_3: q_3 - q_4 - q_5 = 0; \quad q_3 = q_4 + q_5;$$

уравнения баланса МР по массовым расходам компонента С:

$$f_4: q_1 c_1 + q_5 c_5 - q_2 c_2 = 0;$$

$$f_5: q_2 c_2 - q_3 c_3 - k c_3 V = 0;$$

$$f_6: q_3 c_3 - q_4 c_4 - q_5 c_5 = 0;$$

$$f_7: c_5 / c_4 - \delta = 0,$$

где  $q_i$  – общий массовый расход ТП;  $c_i$  – концентрация компонента С в  $i$ -ом ТП;  $k$  – константа скорости реакции;  $V$  – объем реактора;  $\delta$  – степень разделения по компоненту С.

Для рассматриваемой ХТС имеем  $N = 7$ ,  $M = 13$ , а число СВИП  $F = 6$ . На рис. 6.12 показан неориентированный ДИГ системы уравнений  $f_1 - f_7$ . Применение алгоритма ОСР-І к ДИГ состоит из следующих шагов: вычеркнуть из исходного ДИГ  $x$ -узлы ( $c_1$ ,  $V$  и  $\delta$ ), а также смежные с ними  $f$ -узлы ( $f_4$ ,  $f_5$  и  $f_7$ ). Получится ДИГ (см. рис. 6.12,б), для которого в соответствии с алгоритмом ОСР-І повторяют операции первого и второго шагов, что приводит к ДИГ, изображенному на рис. 6.12,в. Окончательно в качестве оптимального набора СВИП выбирают:  $c_2$ ,  $c_4$ ,  $c_5$ ,  $q_3$ ,  $q_5$  и  $k$ .

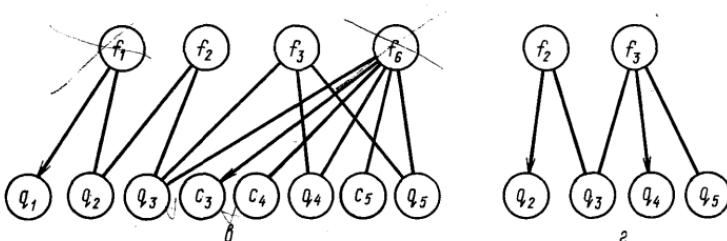
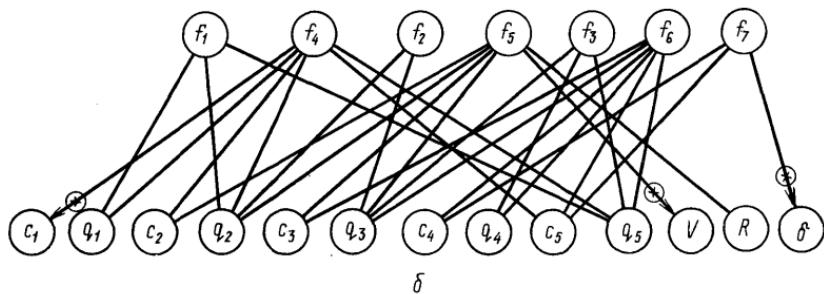
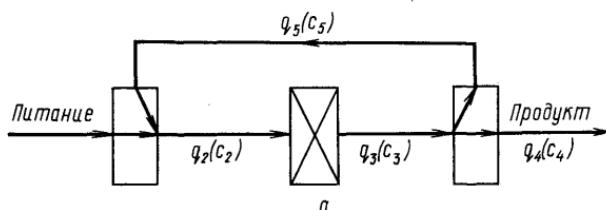


Рис. 6.12. Операторная схема одноконтурной ХТС (а) и последовательные шаги выполнения алгоритма ОСР-І (б-в)

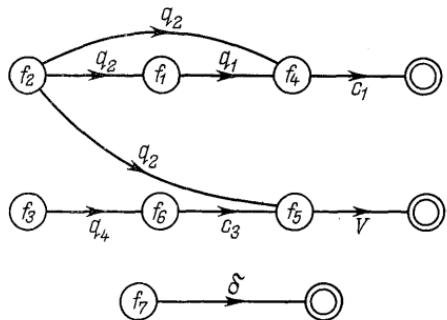


Рис. 6.13. Ациклический информационный граф системы уравнений (свободные информационные переменные не изображены)

Ациклический информационный граф СУ  $f_1 - f_7$  представлен на рис. 6.13. Если, например, по технологическим условиям величина  $q_2$  регламентирована, то величину  $q_2$  заранее до применения алгоритма ОСР-І нужно рассматривать как СВИП. В этом случае число СВИП, которые необходимо выбрать по алгоритму ОСР-І, уменьшается на 1, а исходный ДИГ, не содержащий узла  $q_2$ , преобразовать по алгоритму ОСР-І.

Для ХТС, имеющих многомерные системы уравнений, формализация операций алгоритма ОСР-І на ЭВМ выполняется с использованием операций преобразования матрицы смежности ДИГ [H] (см. раздел 4.5) путем перестановки ее рядов.

В результате перестановки рядов исходной матрицы смежности  $[H]$  получают упорядоченную матрицу  $[\tilde{H}]$ , в которой все выходные переменные отображаются единичными диагональными элементами. Обычно единичная диагональ сдвинута вверх или вниз по отношению к главной диагонали  $[\tilde{H}]$ .

Оптимальному набору СВИП будет соответствовать такая упорядоченная матрица  $[\tilde{H}^*]$ , в которой максимальное число нулевых элементов располагается над единичной диагональю. Последовательность  $f$ -вершин в упорядоченном ИГ соответствует порядку строк в упорядоченной матрице  $[\tilde{H}^*]$ .

При преобразовании матрицы  $[H]$  вычеркивание некоторого узла и ребер ДИГ соответствует вычеркиванию определенных рядов матрицы  $[H]$ . Применительно к матрице смежности  $[H]$  основные шаги алгоритма ОСР-І имеют следующий вид:

1) столбцы  $[H]$ , соответствующие регламентированным, узко ограниченным и дискретным оптимизирующими проектным переменным ХТС (см. раздел 2.10), вычеркнуть из исходной матрицы;

2) найти в  $[H]$ , такой  $x_i$ -столбец, который содержит только единственный единичный элемент. Вычеркнуть  $x_i$ -й столбец и  $f_n$ -ю строку из  $[H]$ . Записать последний справа столбец и последнюю снизу строку упорядоченной матрицы;

3) повторить шаг 2) пока все строки не будут исключены из  $[H]$ ;

4) столбцы, которые оказались в результате повторения шагов 2) и 3) невычеркнутыми из  $[H]$ , соответствуют оптимальному набору СВИП;

5) если после выполнения шагов 2) и 3) остаются не вычеркнутыми из  $[H]$  строки, то эти строки соответствуют наличию совместно замкнутой СУ.

Пример 6.6. Выбрать оптимальный набор СВИП для теплообменника, рассмотренного в примере 2.11, используя алгоритм ОСР-І, примененный для преобразования матрицы смежности  $\tilde{H}$  ДИГ его системы уравнений. По технологическим условиям заданы регламентированные переменные:  $W_1^*, t_1^*, t_2^*, t_3^*$ .

*Решение.* Матрица смежности  $[H_1]$  ДИГ, построенная по СУ теплообменника, не содержит столбцов регламентированных переменных  $W_1^*, t_1^*, t_2^*, t_3^*$  и столбец, соответствующий оптимизирующей переменной  $K$ -конструкционный тип ТА ( $K$  может принимать только дискретные значения) и имеет следующий вид (элемент 1 отображает выходную переменную уравнения):

$$[H_1] = \begin{array}{c|cccccc} & Q & A & h & W_2 & t_4 & \Delta T \\ \hline f_1 & 1 & \textcircled{1} & 1 & 0 & 0 & 1 \\ f_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \\ f_3 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ f_4 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 \\ f_5 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}$$

В результате преобразования по алгоритму ОСР-І исходной матрицы  $[H_1]$  получают матрицы  $[H_2]$ ,  $[H_3]$  и  $[H_4]$ :

$$[H_2] = \begin{array}{c|ccccc} & Q & h & W_2 & t_4 & \Delta T \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \textcircled{1} \\ 0 & \textcircled{1} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \textcircled{1} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{array};$$

$$[H_3] = \begin{array}{c|ccc} & Q & W_2 & t_4 \\ \hline f_3 & 0 & \textcircled{1} & \textcircled{1} \\ f_4 & 0 & 0 & 0 \\ f_5 & 1 & 0 & 0 \end{array}; [H_4] = [\textcircled{1}].$$

Таким образом, выбран оптимальный набор СВИП:  $W_1^*, t_2^*, t_3^*$  и  $K$ , обеспечивающий получение ациклического ИГ системы уравнений теплообменника (рис. 6.14). Ациклическому ИГ соответствует упорядоченная треугольная матрица смежности  $\tilde{H}$  ориентированного ДИГ, диагональные элементы которой  $h_{ii} = 1$  определяют выходные переменные уравнений:

$$\tilde{H} = \begin{array}{c|ccc} & Q & & \Delta T \\ \hline f_5 & \textcircled{1} & & \\ f_4 & & \textcircled{1} & \\ f_2 & & 1 & \textcircled{1} \end{array}.$$

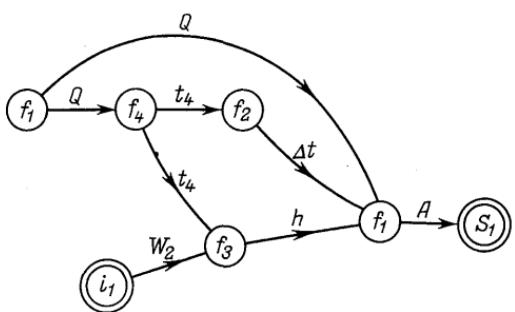


Рис. 6.14. Ациклический информационный граф системы уравнений математической модели теплообменника (регламентированные переменные не изображены)

Из рассмотрения ациклического ИГ (рис. 6.14) и исходной матрицы смежности ДИГ [ $H_1$ ] становится очевидно, что выбирать в качестве СВИП переменную  $A$  – поверхность теплообмена – нецелесообразно, так как это приведет к циклическому ИГ, т. е. к появлению бикомпонент, отображающих необходимость проведения итераций по разрываемым выходным переменным (см. разделы 3.2, 4.5.1 и 4.5.2).

## 6.2.2. Алгоритм оптимизации стратегии решения совместно замкнутых систем уравнений

Рассмотрим алгоритм оптимизации стратегии решения совместно замкнутых СУ: алгоритм ОСР-II, базирующийся на анализе структуры неориентированных ДИГ (см. раздел 4.5.1).



Рис. 6.15. Алгоритм оптимизации стратегии решения совместно замкнутых систем уравнений, базирующийся на анализе двудольных информационных графов (алгоритм ОСР-II)

Алгоритм ОСР-II, блок-схема которого представлена на рис. 6.15, основан на выделении в совместно замкнутой СУ минимальной группы из  $k$  уравнений, обладающих тем свойством, что после их удаления из исходной СУ появляется хотя бы одна информационная переменная, входящая только в одно уравнение совместно разомкнутой подсистемы. ДИГ  $k$ -разрывов  $G_k$  – это такой подграф исходного ДИГ  $G_0$ , состоящий из множества  $k$  вершин типа  $f$  и вершин типа  $x$ , удаление которого из исходного ДИГ совместно замкнутой СУ обеспечивает ацикличность структуры оставшегося ДИГ  $G^* \subset G_0$  и соответствующего ему ИГ.

Оптимальной структуре упорядоченного эквивалентного ИГ совместно замкнутой СУ соответствует минимальный ДИГ  $k$ -разрывов, содержащий наименьшее число вершин. Алгоритм ОСР-II основан на переборе в исходном неориентированном ДИГ  $G_0$  возможных ДИГ  $k$ -разрывов, начиная с минимальной величины  $k_0 = \{\min \rho(x_i) - 1\}$ . Для каждой комбинации из  $k_0$  уравнений определяют возможность получения ациклической структуры оставшегося ДИГ  $G^*$ . Если для всех наборов комбинаций из  $k$  уравнений ДИГ  $G^*$  не является ациклическим, то далее рассматривают наборы комбинаций  $k' = (k + 1)$  уравнений, которые могут обеспечить ациклическую структуру ДИГ  $G^{* \prime}$ , образованного после удаления из исходного ДИГ  $G_0$  группы  $(k + 1)$   $f_i$ -вершин и  $x_j$ -вершин, соответствующих выходным переменным  $f_i$ -уравнений.

Пример 6.7. Для системы уравнений  $f_1(x_1, x_2) = 0; f_2(x_1, x_3, x_4) = 0; f_3(x_2, x_3, x_4, x_5, x_6) = 0; f_4(x_4, x_5, x_6) = 0$  построить оптимальный набор СВИП и ИГ данной СУ.

Решение. Матрица смежности  $[H]$  исходного неориентированного ДИГ:

$$[H] = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 \\ f_1 & \left[ \begin{array}{cccccc} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right] \\ f_2 & \\ f_3 & \\ f_4 & \end{matrix}.$$

Так как из  $[H]$  видно, что  $\rho(x_i) \geq 2$  и  $\rho(f_j) \geq 2$ , необходимо применить алгоритм ОСР-II для построения оптимального ИГ. Определяют величину  $\min \rho(x_i) = 2$  для вершин  $x_1, x_2, x_3, x_5$  и  $x_6$ . Следовательно, величина  $k_0 = 1$ . Вычеркивание из матрицы  $[H]$  первой строки, соответствующей  $f_1$ , даст упрощенную матрицу  $[H_0]$ .  $x_2$  выбирают как выходную переменную для  $f_1$ . Столбец  $x_2$  вычеркивают из  $[H_0]$ , в результате этого получают матрицу  $[H_1]$ .

$$[H_0] = \begin{matrix} & x_1 & x_2 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 \\ f_2 & \left[ \begin{array}{ccccc} 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{array} \right] \\ f_3 & \\ f_4 & \end{matrix};$$

$$[H_1] = \begin{bmatrix} f_2 & \begin{matrix} x_1 & x_3 & x_4 & x_5 & x_6 \end{matrix} \\ f_3 & \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \\ f_4 & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} \end{bmatrix}.$$

Последовательное применение к матрице  $[H_1]$ , в которой  $p(x_1) = 1$ , алгоритма ОСР-І позволяет определить, что  $x_1$  является выходной для  $f_2$ ,  $x_3$  – выходной для  $f_3$ ,  $x_4$  – выходной для  $f_4$ . После удаления из матрицы  $[H_1]$  указанных строк и столбцов имеем  $p(x_5) = p(x_6) = 0$ . Так как степень свободы СУ равна  $F = 2$ , переменные  $x_5$  и  $x_6$  являются СВИП. Оптимальный циклический ИГ с одним разрывом по дуге  $x_2$  представлен на рис. 6.16.

В заключении этого раздела необходимо подчеркнуть, что выбор стратегии расчета систем уравнений ХТС оказывает существенное влияние на сходимость вычислений.

Рассмотрим одноконтурную ХТС (см. рис. 6.17, а). СУ материального баланса по расходу вещества  $A$  имеет вид:  $f_1: q_3 = 0,5q_2$ , где 0,5 – степень превращения в реакторе;  $f_2: q_3 = q_5; f_3: q_2 = q_1 + q_5; f_4: q_1 = 1000$  – расход вещества  $A$  на входе в ХТС (кг/ч), где  $q_i$  – массовый расход вещества  $A$  в  $i$ -ом ТП. Эта СУ имеет решение:  $q_2 = 2000$ ,  $q_3 = q_5 = 1000$ . Используем этот пример, чтобы показать важность выбора рациональной стратегии расчета для обеспечения сходимости вычислений.

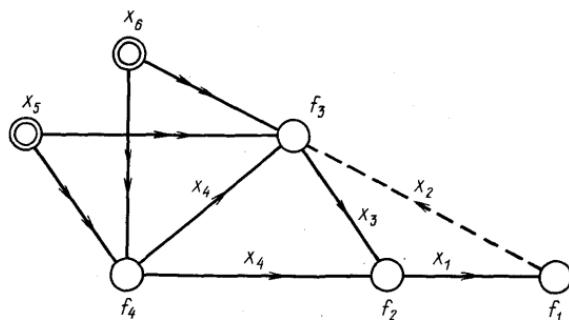


Рис. 6.16. Оптимальный циклический информационный граф совместно замкнутой системы уравнений

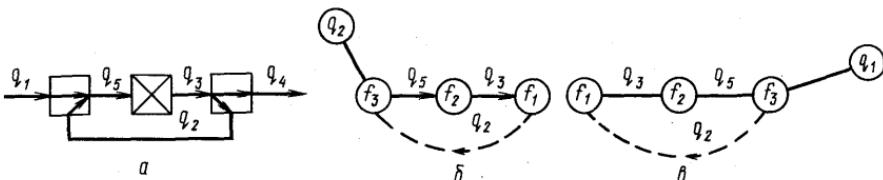
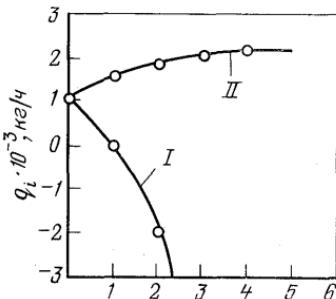


Рис. 6.17. Операторная схема одноконтурной ХТС (а) и информационные графы (б, в), соответствующие двум возможным стратегиям решения некоторой системы уравнений математической модели ХТС

Рис. 6.18. График сходимости решений системы уравнений материального баланса ХТС  
1-6 на оси абсцисс – номера итераций



Две возможные стратегии решения СУ представлены в виде ИГ, показанных на рис. 6.17, б, в. Оба ИГ предполагают разрыв переменной  $q_2$ . На рис. 6.18 показаны графики сходимости вычислений при решении СУ по этим двум стратегиям: I стратегия дает расходящийся результат; II стратегия дает сходящийся результат. Различием между стратегиями I и II является только направление расчета. Очевидно, что анализ сходимости вычислений является одной из важнейших задач при моделировании сложных ХТС.

### 6.3. Контрольные вопросы и задания для самостоятельной работы

В.6-1. Назовите основные этапы разработки оптимальной стратегии анализа ХТС с применением ППГ.

В.6-2. Назовите булевские матрицы, которые используются для идентификации элементарных конфигураций в структуре ППГ: прямых путей и контуров, имеющих произвольную максимальную длину. Запишите выражения для значений общих элементов этих матриц.

В.6-3. Какие булевские матрицы позволяют идентифицировать бикомпоненты в структуре ППГ?

В.6-4. Сформулируйте следующие понятия, используемые для анализа структуры ППГ: матрица контуров  $[\mathfrak{L}]$ ; расширенная матрица контуров  $[\mathfrak{L}^*]$ ; новая расширенная матрица контуров  $[\mathfrak{L}^{**}]$ ; ранг контура  $r$  и контурная степень дуги  $f$ ; дуга  $p_i$  геометрически содержит дугу  $p_j$ ; статус дуги и статус контура для ППГ с различной параметричностью дуг; избыточная дуга; столбец  $p_i$ -минор столбца  $p_j$ ; дуга  $p_i$  строго содержится в дуге  $p_j$ .

В.6-5. Каким образом технолог выбирает предпочтительные дуги при анализе ППГ?

В.6-6. Какие критерии используют для оценки оптимальности стратегии анализа ХТС с применением ППГ?

В.6-7. Сравните показатели эффективности методов Ньютона и Вольфа при решении СНУ (2.45), к которому сводится задача анализа сложной ХТС.

В.6-8. Сформулируйте основной критерий оптимального выбора СВИП и выходных переменных по структуре исходного неориентированного ДИГ.

В.6-9. Какие интерактивные процедуры необходимы при реализации алгоритма ОСР-І?

В.6-10. Назовите основные операции алгоритма ОСР-ІІ для оптимального выбора СВИП совместно замкнутых систем уравнений.

3.6-1. Составьте блок-схему алгоритма идентификации простых контуров ППГ с использованием матрицы ветвей  $[L]$  орграфа.

3.6-2. В соответствии с алгоритмом ОСР-І, т.е. алгоритмом выбора оптимального набора СВИП систем уравнений, составьте блок-схему алгоритма

построения по исходной матрице смежности неориентированного ДИГ [H], матрицы смежности ориентированного ДИГ [ $\tilde{H}$ ], отражающей структуру ИГ.

3.6-3. В соответствии с разделом 6.1.4 составьте блок-схему алгоритмов упорядочения по слоям вершин любого произвольного сетевого графа, содержащего  $n$  вершин-истоков и  $m$  вершин-стоков с использованием матрицы смежности [H] и матрицы ветвей [L].

3.6-4. В соответствии с разделом 6.1.2 составьте блок-схемы следующих алгоритмов идентификации простых контуров в ППГ, представляющем собой бикомпоненту: алгоритма ИПК-I, алгоритма ИПК-II и алгоритма, реализующего условия теоремы 4.4.

3.6-5. В соответствии с методикой, изложенной в разделе 6.1.1, используя теоремы 6.2 и 6.3, составьте блок-схему алгоритма выделения бикомпонент в орграфе.

3.6-6. С использованием алгоритмов, изложенных в разделах 6.1.2–6.1.4 определите минимальное множество особых дуг и постройте упорядоченный по слоям вершин эквивалентный ациклический ППГ для многоконтурного ППГ (параметричность дуг одинакова), который отображает следующая двухстрочная матрица дуг орграфа:

$$e = \begin{matrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \end{matrix}$$
$$[L] = \begin{matrix} n \\ k \end{matrix} \left[ \begin{matrix} 1 & 5 & 1 & 3 & 4 & 5 & 2 & 4 \\ 3 & 1 & 5 & 5 & 3 & 2 & 4 & 2 \end{matrix} \right].$$

3.6-7. В соответствии с методикой, изложенной в разделе 6.1.1, составьте общую укрупненную блок-схему комплексного алгоритма оптимизации стратегии анализа сложных встречно направленных ХТС, который должен включать отдельные алгоритмы ДСС, алгоритм ИПК, алгоритм ОСА и алгоритм УСВ, описанные в разделах 6.1.2–6.1.4. Отдельно укажите интерактивные процедуры, выполняемые технологом в диалоге ЭВМ.

3.6-8. Составьте блок-схему алгоритма оптимизации стратегии расчета ХТС с использованием матрицы ветвей ДИГ.

## Глава 7

# ДЕКОМПОЗИЦИОННО-ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ АНАЛИЗА И ОПТИМИЗАЦИИ СЛОЖНЫХ ХТС

## 7.1. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ АНАЛИЗА ХТС

В общем случае математическая модель ХТС представляет собой систему нелинейных алгебраических и (или) дифференциальных уравнений вида:

$$\tilde{\mathfrak{F}}(\dot{\bar{x}}, \bar{x}, t) = 0, \quad (7.1)$$

где  $\tilde{\mathfrak{F}}$  – вектор-функция;  $\bar{x}$  – вектор переменных модели;  $t$  – время.

Численные методы решения СУ (7.1), обеспечивающие получение параметров динамических и статических режимов ХТС, включают в себя процедуры численного интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) и решения

систем нелинейных алгебраических уравнений (СНАУ). Выбор конкретных численных методов решения для каждой из этих процедур обуславливает вид формул алгебраизации и линеаризации отдельных соотношений, входящих в (7.1). Осуществляя алгебраизацию каждого ОДУ, содержащего производные по времени и используя неявный метод Эйлера, преобразуют исходную СУ (7.1) в СНАУ вида

$$\tilde{f}(x_{n+1}, A_{n+1}) = 0, \quad (7.2)$$

где  $A_{n+1}$  – вектор констант линеаризации.

СУ типа (7.2) используют для составления СУ статических режимов ХТС в целом, которая имеет вид:

$$\tilde{f}(\bar{x}, t) = 0. \quad (7.3)$$

Различие выражений (7.3) и (7.2) состоит в том, что в (7.2) вид функционала  $\tilde{f}$  зависит от интервала времени решения, поэтому уравнение (7.2) решается на каждом временном шаге. Обобщенная схема численных методов определения динамических режимов ХТС сводится к многократной процедуре нахождения квазистатических состояний ХТС для каждого интервала времени, на которых проводится алгебраизация динамических соотношений (рис. 7.1).

Нелинейное алгебраическое уравнение типа (7.3) и (7.2) решают итерационно, например, используя метод Ньютона при этом

$$[x_{n+1}^{(m+1)}] = [x_{n+1}^{(m)}] - [f([x_{n+1}^{(m)}], t_{n+1})]/[J([x_{n+1}^{(m)}], t_{n+1})], \quad (7.4)$$

где  $[J([x_{n+1}^{(m)}], t_{n+1})] = [\partial f / \partial x_{n+1}^{(m)}]$  – матрица Якоби;  $m$  – номер текущей итерации ( $m = 0$  соответствует некоторое начальное значение  $[x_{n+1}^0]$ ).

Матрица Якоби, определяемая при линеаризации нелинейных соотношений первыми производными разложения ряда Тейлора

$$[J([x_{n+1}^{(m)}], t_{n+1})] = [A([x_{n+1}^{(m)}])], \quad (7.5)$$

совпадает по форме с матрицами математических моделей ХТС.

Подставляя (7.5) в (7.4), находят

$$[A([x_{n+1}^{(m)}])] [x_{n+1}^{(m+1)}] = [b([x_{n+1}^{(m)}])], \quad (7.6)$$

где  $[B([x_{n+1}^{(m)}])] = [A([x_{n+1}^{(m)}])] [x_{n+1}^{(m)}] = [f([x_{n+1}^{(m)}], t_{n+1})]$ .

Таким образом, система (7.6) линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) итеративно решается до тех пор, пока максимальная погрешность координат переменных  $x$  становится меньше заданной, т. е.

$$E_{\max} = \max |x_{i(n+1)} - x_{i(n+1)}^{(m)} / x_{\max}| < \varepsilon; \quad i = \overline{1, n}. \quad (7.7)$$

Общая блок-схема численных методов решения СНАУ представлена на рис. 7.2.



Рис. 7.1. Общая блок-схема численных методов решения систем уравнений динамических режимов ХТС

Рис. 7.2. Общая блок-схема численных методов решения систем нелинейных алгебраических уравнений (СНАУ)

Таким образом, решение произвольной СУ математической модели ХТС сводится к многократному (сотни, а иногда тысячи раз) решения СЛАУ (7.6), в котором выделяются два цикла: внешний цикл временных итераций по индексу  $n$ , когда корректируются аппроксимации для производных по времени от переменных ММ, и внутренний цикл итераций по индексу  $m$ , когда на каждом выбранном временном интервале с использованием метода Ньютона уточняется линейная аппроксимация нелинейных переменных СУ. Внутренний цикл решения по индексу  $m$  имеет самостоятельное значение при анализе статических режимов ХТС.

Задачи анализа статических режимов сложных ХТС сводятся к задачам решения некоторых СНАУ с использованием различных методов. Отметим, что задача решения СНАУ, к которой помимо задач расчета статических режимов ХТС сводится ряд других важных задач математического моделирования ХТП, например расчет противоточных аппаратов (ректификационных колонн, абсорбера, теплообменников и др.), является одной из наиболее распространенных вычислительных задач в химической технологии.

Необходимо подчеркнуть, что при использовании последовательного технологическо- и информационно-направленных способов расчета ХТС (см. раздел 2.5) существует определенная специфика алгоритмов и методов решения СНАУ вида:

$$\bar{F}(\bar{x}) = 0, \quad (7.8)$$

где  $\bar{F}$  – заданный вектор-оператор;  $\bar{F}(\bar{x}) = [f_1(\bar{x}), f_2(\bar{x}), \dots, f_n(\bar{x})]^T$ ;  $\bar{x}$  – вектор переменных.

Очевидно, при заданном  $\bar{x}$  нельзя рассчитать отдельно левую часть одного или нескольких уравнений СНАУ (7.8), рассчитать их можно только совместно. Это не позволяет использовать при решении СНАУ методы, в которых предусмотрена операция обработки каждого отдельного уравнения системы (7.8), например метод Гаусса–Зейделя в случае СЛАУ и метод Брауна в случае СНАУ.

Методы решения СНАУ (7.8), используемые при анализе ХТС, можно разделить на три класса: 1) метод простой итерации и его модификации, а также методы, ускоряющие сходимость простой итерации; 2) метод Вольфа и его модификации; 3) квазиньютоновские методы. Метод Ньютона и квазиньютоновские методы решения СНАУ весьма близки к методу Ньютона и квазиньютоновским методам оптимизации. Будем говорить, что метод обладает  $p$ -шаговым свойством линейного окончания, если он обеспечивает решение СЛАУ при числе шагов, не превышающем  $p$ .

## 7.2. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

К итерационным методам решения СНАУ (7.8) относятся: метод простой итерации и такие его разновидности с улучшенной сходимостью, как метод модифицированной итерации; метод доминирующего собственного значения (ДЕМ) и обобщенный метод доминирующих собственных значений (ГДЕМ); метод Ньютона и его модификации; различные разновидности метода секущих, в частности метод Вольфа; квазиньютоновские методы.

Во всех итерационных методах  $(k+1)$ -е приближение ищется по значениям уже известных  $k, (k-1), \dots, (k-s)$  приближений, где  $s$  – величина, характеризующая число используемых приближений, так для метода простой итерации и метода Ньютона  $s=0$ , а для метода Вольфа  $s=n$ .

### 7.2.1. Метод простой итерации и его модификации

При использовании метода простой (или модифицированной) итерации каждое уравнение исходной СНАУ (7.8) должно быть преобразовано к виду:

$$x_i = \varphi_i(x_1, x_2, \dots, x_n); \quad i = \overline{1, n}. \quad (7.9)$$

Каждое  $(k+1)$ -е приближение определяется по итерационной процедуре:

$$x_i^{(k+1)} = \varphi_i(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}); \quad i = \overline{1, n}; \quad k = 0, 1, 2 \dots \quad (7.10)$$

где верхние индексы  $(k, k+1)$  означают номер итерации;  $x_i^{(0)}$  – исходное (начальное) приближение.

Для сходимости итерационного процесса достаточно выполнения условия:

$$\sum_{j=1}^n |\partial \phi_i / \partial x_j| < 1; \quad i = \overline{1, n}. \quad (7.11)$$

Метод простой итерации рекомендуется применять тогда, когда известно хорошее начальное приближение, и исходная система легко преобразуется к виду (7.9). К сожалению, итерационная процедура (7.10) часто расходится. В некоторых случаях удается обеспечить сходимость, используя модифицированные методы простой итерации: метод ДЕМ и ГДЕМ, которые являются обобщением метода линейной экстраполяции. При использовании модифицированной итерации  $(k+1)$ -е приближение вычисляют по формуле:

$$x_i^{(k+1)} = \alpha x_i^{(k)} + (1 - \alpha) \phi_i(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}); \quad (7.12)$$

$$0 < \alpha < 1; \quad i = \overline{1, n}; \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Отметим, что метод простой итерации является частным случаем методов модифицированной итерации, при этом  $\alpha = 0$ . Алгоритм методов модифицированной итерации следующий:

1) вычисление по известным значениям предыдущей итерации нового приближения по формулам:

$$y_i = y_i(x_1, x_2, \dots, x_n); \quad i = 1, \dots, n;$$

$$2) \text{ вычисление } s = \sum_{i=1}^n [(x_i - y_i)/x_i]^2;$$

$$3) \text{ вычисление } x_i = \alpha x_i + (1 - \alpha) y_i; \quad i = 1, 2, \dots, n;$$

4) проверка:  $s > \varepsilon$ , где  $\varepsilon$  – заданная погрешность вычислений. Если неравенство выполнено, то повторить 1). В противном случае – останов.

## 7.2.2. Метод Ньютона

Сущность метода Ньютона (его также называют методом линеаризованных итераций) состоит в том, что решение СНАУ (7.8) сводится к решению последовательности линейных алгебраических уравнений вида:

$$f_i(x^k) + \sum_{j=1}^n f'_{i,x_j}(x^k) \Delta x_j^k = 0. \quad (7.13)$$

Для получения уравнения (7.13) вектор-функцию  $f_i(x_1, \dots, x_n)$  разлагают в ряд Тейлора, нелинейные члены приравнивая нулю. Систему уравнений (7.13) можно записать в матричной форме:

$$[J^k] \Delta \bar{x}^k = -\bar{F}(\bar{x}^{(k)}), \quad (7.14)$$

где  $[J^k]$  – невырожденная матрица Якоби:  $[J^{(k)}] = [J(x^k)] = [\partial f_i / \partial x_j]_k$ .

Последовательные приближения для решения СНАУ (7.8) в этом случае строятся следующим образом:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \Delta \bar{x}^{(k)}, \quad (7.15)$$

где  $\Delta \bar{x}^{(k)}$  – решение системы (7.14), которое равно

$$\Delta x^{(k+1)} = -[J(x)^k]^{-1} \bar{F}(x^{(k)}). \quad (7.16)$$

Практическое применение метода Ньютона сопряжено с некоторыми вычислительными трудностями. Во-первых, на каждом шаге итерации нужно решать СНАУ. Во-вторых, на каждом шаге нужно определять не только значения функций  $f_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ), но также  $n^2$  элементов матрицы  $\bar{F}'(\bar{x}^k)$  и если частные производные  $\partial f_i / \partial x_j$  не имеют простого аналитического вида, то часто желательно обойтись без их вычисления.

Наиболее простой способ избежать вычислений производных состоит в аппроксимации, т. е. в использовании приближенных формул:

$$\begin{aligned} \partial f_i / \partial x_j \approx & [f_i(x_1, x_2, \dots, x_j + \delta_j, \dots, x_n) - \\ & - f_i(x_1, x_2, \dots, x_j, \dots, x_n)] / \delta_j, \end{aligned} \quad (7.17)$$

$$i = \overline{1, n}; \quad j = \overline{1, n}.$$

Одно из требований, которым должен удовлетворять итерационный процесс, состоит в улучшении последующих итераций, т. е. должно выполняться неравенство:

$$\|\bar{F}(\bar{x}^{(k+1)})\| < \|\bar{F}(\bar{x}^{(k)})\|. \quad (7.18)$$

Однако метод Ньютона не всегда удовлетворяет этому условию, поэтому при плохом начальном приближении часто используется следующая модификация этого метода:

$$\bar{x}^{(k+1)} = -\bar{x}^{(k)} + \beta^{(k)} \Delta \bar{x}^{(k)}, \quad (7.19)$$

где  $\beta^{(k)}$  – демпфирующий коэффициент, который выбирают либо постоянным, либо подбирают на каждой итерации так, чтобы выполнялось соотношение (7.18).

**Алгоритм метода Ньютона:**

- 1) вычисление  $y_i = f_i(x_1, \dots, x_n)$ ;  $i = 1, \dots, n$ ;
- 2) вычисление матрицы производных; для этого, значения от  $j = 1$  до  $j = n$  с шагом 1, вычислить величины ( $\delta_j = 0,01$ , если  $x_j = 0$ , или  $\delta_j = 0,01x_j$ , если  $x_j \neq 0$ ):  $x_j := x_j + \delta_j$ ;  $z_i = f_i(x_1, \dots, x_n)$ ;  $a_{ij} = (z_i - y_i) / \delta_j$ ;  $i = \overline{1, n}$ ;  $x_j := x_j - \delta_j$ ;

3) решение СЛАУ методом Гаусса для определения  $\Delta x_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ).

- 4) вычисление нового приближения:

$$x_i := x_i + \Delta x_i; \quad i = \overline{1, n};$$

5) проверка условия окончания счета. Затем вычислительный процесс либо повторить с 1), если эти условия не выполняются, либо – останов.

В методе Ньютона можно выделить два этапа на каждом шаге: 1) сбор информации для построения аппроксимации матрицы  $[J]$  (7.4); 2) собственно поиск. На втором этапе определяется направление поиска  $[\Delta\bar{x}^{(k)}]$  при помощи выражения (7.16), а затем делается шаг в этом направлении. Поскольку эти два этапа разделены, на каждом шаге приходится вычислить функции  $f(x)$  в  $(n+1)$ -й точке. В этом заключен большой недостаток метода, особенно существенный, когда размерность СЛАУ (7.8) велика.

*Метод Вольфа*, основанный на линейной аппроксимации уравнений СЛАУ (7.8) по вычисленным значениям функций  $f_i$  ( $i = 1, n$ ) в конечном числе точек, при достаточно хорошем начальном приближении сходится примерно с такой же скоростью, как и метод Ньютона. Метод Вольфа выгодно отличается от метода Ньютона тем, что не требует вычисления матрицы  $[J]$ . Однако в этом методе для начала работы требуется иметь  $(n+1)$  начальных приближений, что неудобно в общем по двум причинам: 1) при большом  $n$  может потребоваться много вычислений; 2) получение  $(n+1)$  начальных приближений довольно трудоемкая операция. Эти приближения можно определить, например, используя простую итерацию.

Метод простой итерации может расходиться, и тогда полученные приближения могут расположиться далеко от решения. Однако в методе Вольфа очень важно, чтобы  $(n+1)$  начальных приближений располагались достаточно близко от искомого решения. Поэтому предложена модификация метода Вольфа, которая требует только  $m$  [ $m \leq (n+1)$ ] начальных приближений, а при  $m = (n+1)$  она автоматически переходит в метод Вольфа. Применяя эту модификацию, можно получить первые  $(n+1)$  начальных приближений для метода Вольфа.

### 7.2.3. Квазиньютоновские методы

Сущность квазиньютоновских методов состоит в объединении этапов сбора информации и поиска на каждом итерационном шаге. Причем информацию, которую получают во время поиска, используют для построения аппроксимации  $[B_j]$  матрицы Якоби  $[J_j]$ , либо аппроксимации  $[H_j]$  матрицы  $[J_j]^{-1}$ . По аналогии с соотношениями (7.14), (7.16) направление поиска определяется либо решением СЛАУ

$$[b_j]\Delta\bar{x}_j^k = -\bar{F}, \quad (7.20)$$

либо с применением соотношения

$$\Delta\bar{x}_j^k = -[H_j]\bar{F}. \quad (7.21)$$

Для следующей точки итерации применяется формула (7.19). Преимущество аппроксимации обратной матрицы Якоби  $[J]^{-1}$  состоит в том, что в этом случае не нужно решать СЛАУ, информация относительно функции  $f(x)$ , получаемая во время поиска и используемая для построения матриц  $[B_j]$ ,  $[H_j]$ , должна быть достаточно «качественной».

Рассмотрим два квазиньютоновских метода 1-го рода: метод Бройдена и метод с памятью.

*Квазиньютоновский метод 1-го рода (метод Бройдена).* Как и в методе Ньютона ( $k+1$ -е приближение определяется в методе Бройдена по формуле (7.19)). В методе используется приближенное значение матрицы  $[H_j]$  и корректируется эта матрица после каждой оценки функции. Кроме того, в этом методе предусмотрено выполнение неравенства (7.18). С учетом  $[H_j]$  формула метода Ньютона (7.16) будет иметь следующий вид:

$$\Delta\bar{x}^k = -[H^k]\bar{F}(\bar{x}^k). \quad (7.22)$$

Предположим, что  $[H^0] = [E]$  ( $[E]$  – единичная матрица) и пусть  $\bar{x}^0$  – начальное приближение, тогда на первом шаге  $\Delta\bar{x}^0$  определяется следующим образом

$$\Delta\bar{x}^0 = -[H^0]\bar{F}(\bar{x}^0).$$

Первое приближение определяется по формуле

$$\bar{x}^1 = \bar{x}^0 + \beta^0\Delta\bar{x}^0,$$

где первоначально  $\beta^0 = 1$ , а затем путем деления на два ищется такое значение  $\beta^0$ , при котором выполняется неравенство (7.18). Затем матрицу уточняют по формуле:

$$[H^1] = [H^0] - \{([H]\bar{y}^0 - \Delta\bar{x}^0\beta^0)(\Delta\bar{x}^0)\}^\top[H^0]/\{(\Delta\bar{x}^0)^\top[H^0]\bar{y}^0\}, \quad (7.23)$$

где  $y^0 = \bar{F}(\bar{x}^1) - \bar{F}(\bar{x}^0)$ ;  $\Delta\bar{x}^0 = -[H^0]\bar{F}(\bar{x}^0)$ ; т – символ транспонирования.

Таким образом, на каждой итерации происходит уточнение ( $k+1$ )-го приближения матрицы  $[H_j]$  системы, по формулам:

$$\bar{x}^{k+1} = \bar{x}^k + \beta^k\Delta\bar{x}^k; \quad \Delta\bar{x}^k = -[H^k]\bar{F}\bar{x}^k \quad (7.24)$$

$$[H^{k+1}] = [H^k] - \{([H^k]\bar{y}^k - \Delta\bar{x}^k\beta^k)(\Delta\bar{x}^k)[H^k]\}/\{(\Delta\bar{x}^k)^\top[H^k]\bar{y}^k\}; \quad (7.25)$$

$$\bar{y}^k = \bar{F}(\bar{x}^{k+1}) - \bar{F}(\bar{x}^k); \quad k = 0, 1, \dots \quad (7.26)$$

В качестве  $[H^0]$  часто используют разностную аппроксимацию обратной матрицы Якоби, что снижает длительность итерационных процедур. Алгоритм метода Бройдена следующий:

- 1) задается начальное значение матрицы  $[H]$ :  $[H] = [E]$ ;
- 2) вычисление  $z_i = f_i(x_1, \dots, x_n)$ ,  $i = 1, \dots, n$ ;
- 3) определение  $\Delta x = -[H]z$ ;
- 4) задается  $\beta = 1$ ;
- 5) определение нового приближения:  $\bar{x} = \bar{x} + \beta\Delta x$ ;

6) вычисление значений функций в новой точке:  $\psi_i = f_i(v_1, \dots, v_n); i = 1, \dots, n;$

7) если  $\|\bar{F}_v\| < \|\bar{F}_{\bar{x}}\|$ , то перейти к 8); в противном случае  $\beta := \beta/2$  и перейти к 5);

8) проверка условий окончания счета: если  $\|\bar{F}_v\| < \epsilon$ , то выходят из подпрограммы; в противном случае выполнить 9);

9) определение  $y_j = \psi_i - z_i; i = 1, \dots, n;$

10) вычисление нового приближения матрицы  $[H]$  (7.25);

11) подготовка новой итерации:  $x_i = v_i; z_i = \psi_i$ . Повторить вычислительный процесс с 3).

*Метод с «памятью».* Во всех ранее рассмотренных методах  $s = 0$ , т. е. для построения нового приближения использовалась только предыдущая итерация. Метод с памятью служит для построения следующей итерации на основе запомненных значений переменных на предыдущих итерациях. При этом  $s$  изменяется от 0 до  $\bar{n}_0$  на первых  $n_0$  итерациях, а затем остается равным  $n_0$  ( $n_0 \leq n$ ).

#### 7.2.4. Методы минимизации

Задачу решения системы (7.8) сводят к задаче минимизации функции  $\Phi(\bar{x})$  в  $n$ -мерном пространстве. При этом функция  $\Phi(\bar{x})$  связывается с функциями  $\Phi_i(\bar{x})$  исходной системы соотношением:

$$\Phi(\bar{x}) = \sum_{i=1}^n f_i^2(\bar{x}). \quad (7.27)$$

Для минимизации  $\Phi(\bar{x})$  можно применять любой из градиентных методов.

#### 7.2.5. Метод дифференцирования по параметру

Этот метод позволяет находить корни системы (7.8) без предварительного определения начальных приближений. При решении СНАУ этим методом нужно предварительно ввести в систему (7.8) дополнительную переменную  $\lambda$  и продифференцировать каждое уравнение по этой переменной в предположении, что все переменные  $x_i$  являются функциями переменной  $\lambda$ . В результате получится система ОДУ:

$$d\bar{x}_i/d\lambda = \phi_i(x_1, \dots, x_n, \lambda); \quad i = \overline{1, n}.$$

Численное интегрирование системы ОДУ в интервале  $[0, 1]$  при начальных значениях  $x_i = x_i^0, i = 1, \dots, n$  соответствующих  $\lambda = 0$ , дает при  $\lambda = 1$  искомое решение системы (7.8).

Параметр  $\lambda$  вводится в исходную систему так, чтобы зависимость функции  $f_i(x_1, \dots, x_n, \lambda)$  от  $\lambda$  была по возможности более простой, и при  $\lambda = 1$  преобразованная система уравнений сводилась к исходной системе, а при  $\lambda = 0$  получалась система,

легко разрешимая относительно  $x_i$  ( $i = \overline{1, n}$ ). Точность решения, полученного этим методом, зависит от шага интегрирования и, как правило, бывает невысокой. Поэтому в ряде случаев указанный метод целесообразно применять в сочетании с итерационными методами.

К недостаткам метода следует отнести возможность в некоторых случаях при решении системы дифференциальных уравнений на интервале  $0 \leq \lambda \leq 1$  встретить особые точки, обход которых связан с усложнением вычислительной процедуры.

## 7.3. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

### 7.3.1. Общая характеристика численных методов решения систем линейных алгебраических уравнений

Для решения СЛАУ вида (4.19) используют два класса численных методов: прямые и итерационные. Прямые методы дают решение СЛАУ за конечное число элементарных арифметических операций. Прямые методы, которые просты и наиболее универсальны, практически, применяют для решения СЛАУ небольшого порядка  $n \leq 200$ . Итерационные методы позволяют получить, начиная с некоторого вектора переменных, бесконечную последовательность векторов переменных, которая сходится к решению СЛАУ. Итерационные методы по сравнению с точными методами позволяют при больших  $n$  устраниć нарастающие ошибки округлений, связанные с выполнением значительного числа арифметических операций; они весьма эффективны для решения информационно-разреженных СЛАУ очень больших порядков  $n \simeq 10^3 - 10^5$ .

Прямые методы решения СЛАУ: метод Гаусса и его модификации; метод LU-разложения матрицы СУ; метод прогонки; метод Жордана – Гаусса; метод Холецкого и др. Итерационные методы: метод Гаусса – Зейделя и его модификации; метод симметричной релаксации; метод сопряженных градиентов; метод неполного разложения и др. Для повышения эффективности прямых методов при решении многомерных СЛАУ применяют блочные методы. Блочные методы решения СЛАУ базируются на декомпозиции матрицы системы вектора переменных, вектора свободных членов на отдельные блоки, или клетки. Затем для решения блочной, или клеточной формы СЛАУ используют некоторый прямой метод, сформулированный в виде специальных соотношений, позволяющих в каждый момент времени обрабатывать лишь небольшое число блоков, которые необходимо хранить в ОЗУ. После обработки эти блоки передаются во ВЗУ, а на их место в ОЗУ поступают очередные блоки.

Для увеличения быстродействия вычислительных операций

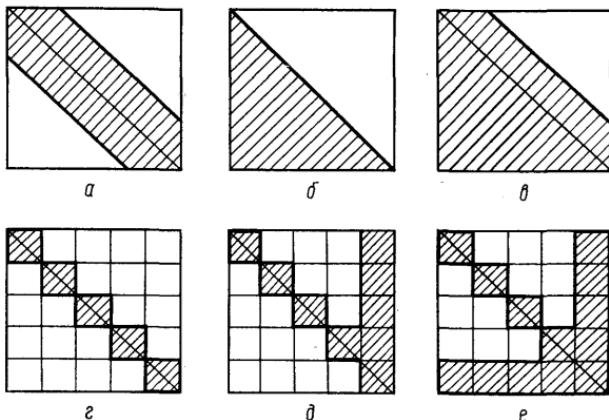


Рис. 7.3. Стандартные блочно-компактные формы информационных структур разреженных матриц (фрагменты с ненулевыми элементами заштрихованы):

*а*—ленточная; *б*—нижняя треугольная; *в*—почти треугольная; *г*—блочно-диагональная с двойным окаймлением; *д*—блочно-диагональная с односторонним окаймлением

и снижения объема памяти ОЗУ при решении многомерных информационно-разреженных СЛАУ и СНАУ применяют наряду с упакованными формами хранения разреженных матриц следующие специальные методы их решения: диакоптические методы, методы оптимального упорядочения информационной структуры (перестановки рядов) разреженных матриц для получения СБКФ; топологические методы разработки оптимальной стратегии решения СУ на основе метода последовательной подстановки (см. разд. 3.2 и 4.5). Диакоптические методы позволяют свести решение многомерной сложной задачи к решению ряда более простых подзадач.

Методы приведения разреженных СЛАУ к одной из СБКФ с использованием различных упакованных форм хранения разреженных матриц позволяют поддерживать наибольшую степень их разреженности и обеспечивать оптимальную организацию арифметических операций.

Выделяют следующие СБКФ разреженных матриц: ленточную (Л), треугольную (Т), квазитреугольную (КТ), блочно-диагональную (БД), блочно-диагональную с двойным окаймлением (БДДО), БД с одинарным окаймлением и др. (рис. 7.3). Можно показать, что невыполнение операций с нулевыми элементами дает значительную экономию машинного времени при решении разреженных СЛАУ с почти треугольной матрицей, требует всего  $2n^2$  арифметических операций, где  $n$ —порядок СЛАУ, а с ленточной—даже  $0,5k^2n$ , где  $k$ —ширина ленты. Общее выражение для определения элемента почти треугольной матрицы имеет вид:  $a_{ik} = 0$  при  $i > (k + 1)$ .

### 7.3.2. Прямые итерационные методы

Для решения СЛАУ вида (4.19) наиболее часто используется метод последовательного исключения Гаусса или одна из его модификаций. Если правая часть (4.19) изменяется многократно, то рекомендуется применять метод  $LU$ -разложения, в соответствии с которым матрица  $A$  системы представляется произведением нижней треугольной матрицы с единичной диагональю  $[L]$  и верхней треугольной матрицы  $[U]$ :

$$[A] = [L] [U]. \quad (7.28)$$

При этом элементы матриц  $[L]$  и  $[U]$  определяются с использованием следующих рекуррентных формул:

$$\left. \begin{aligned} u_{sj} &= a_{sj} - \sum_{k=1}^{s-1} l_{sk} u_{kj}, \quad j = s, s+1, \dots, n; \\ l_{is} &= (a_{is} - \sum_{k=1}^{s-1} l_{ik} u_{ks}) / u_{ss}, \quad i = s+1, \dots, n; \end{aligned} \right\} \quad s = 1, n, \quad (7.29)$$

где  $n$  – размерность решаемой системы уравнений (4.19);  $a$ ,  $l$ ,  $u$  – элементы матрицы  $[A]$ ,  $[L]$ ,  $[U]$  соответственно.

После  $LU$ -разложения матрицы  $[A]$  решение СЛАУ (4.19) заменяется последовательным решением двух СЛАУ с треугольными матрицами  $[L]$   $[y] = [b]$ ,  $[U]$   $[x] = [y]$  с использованием метода простой подстановки:

$$\left. \begin{aligned} y_i &= b_i - \sum_{s=1}^{i-1} l_{is} y_s, \quad i = 1, 2, \dots, n; \\ x_i &= (y_i - \sum_{s=i+1}^n u_{is} x_s) / u_{ii}; \quad i = n, n-1, \dots, 1. \end{aligned} \right\} \quad (7.30)$$

Для СЛАУ очень большой размерности предпочтительно вместо  $LU$ -преобразования применять итерационный метод Гаусса – Зейделя. В матрице  $[A]$  системы (4.19) выделяют диагональную  $[D]$ , нижнюю  $[L]$  и верхнюю, а также треугольные матрицы  $[A] = [D] + [L] + [U]$ . Затем на каждой  $m$ -й итерации решается треугольная СЛАУ относительно каждой переменной

$$x_i^{m+1} = D_{ii}^{-1} (b_i - \bar{L}_i [\hat{x}^{m+1}] - \bar{U}_i [x^m]), \quad (7.31)$$

где  $\bar{L}_i$  и  $\bar{U}_i$  –  $i$ -е строки матриц  $[L]$  и  $[U]$ ;  $[\hat{x}^{m+1}] = [x_1^{m+1}, \dots, x_{i-1}^{m+1}, x_i^{m+1}, x_{i+1}^{m+1}, \dots, x_n^{m+1}]^\top$ .

Уравнение (7.31) содержит только одну неизвестную переменную  $x_i^{m+1}$ , так как переменные  $x_1^{m+1}, x_2^{m+1}, x_3^{m+1}, \dots, x_{i-1}^{m+1}$  уже определены к моменту вычислений. Этим достигается разбиение исходной СЛАУ на отдельные уравнения или их блоки (группы), что существенно повышает эффективность вычислений.

Число итераций  $m$  и, следовательно, сходимость вычислений определяются величиной погрешности:  $\varepsilon^{m+1} = \| \hat{x}^{m+1} - \bar{x}^m \|$ , для которой справедливо соотношение:  $\varepsilon^{m+1} = \| (1 - [D]^{-1} [L]) \times$

$\times [D]^{-1}[U] \parallel \varepsilon^m = \|M\| \varepsilon^m$ , из которого следует, что итерационный процесс вычислений будет сходиться для любых начальных значений  $x$ , если все собственные значения матрицы  $[M]$  по модулю меньше единицы.

В общем случае сходимость зависит от численных значений матриц  $[L]$ ,  $[D]$  и  $[U]$ . Обычно быстро сходится несколько первых итераций, а затем процесс замедляется, асимптотически следя линейному закону.

Скорость сходимости можно повысить, если упорядочением строк и столбцов исходной матрицы  $[A]$  предварительно привести ее к форме, максимально приближающейся к нижней треугольной матрице. Сходимость итерационного процесса можно также улучшить повышением симметричности метода Гаусса–Зейделя, если от одностороннего процесса вычислений перейти к двунаправленному. В первом случае одна из каждой пары смежных итераций выполняется в обычном направлении, используя нижнюю треугольную матрицу  $[L]$ , а вторая – в противоположном с использованием верхней треугольной матрицы  $[U]$ . Тогда вместо (7.31) поочередно применяют выражения:

$$x_i^m = D_{ii}^{-1}(b_i - \bar{L}_i[\hat{x}^m] - \bar{U}_i[x^{m-1}]), \quad i = \overline{1, n}; \quad (7.32)$$

$$x_j^{m+1} = D_{jj}^{-1}(b_j - \bar{L}_j[x^m] - \bar{U}_j[\hat{x}^{m+1}]), \quad j = n, n-1, \dots, 1; \quad (7.33)$$

где  $[\hat{x}^m] = [x_1^m, \dots, x_i^m, x_{i+1}^{m-1}, \dots, x_n^{m-1}]^T$ ,  $[\hat{x}^{m+1}] = [x_1^m, \dots, x_{j-1}^m, x_j^{m+1}, \dots, x_n^{m+1}]^T$ .

СЛАУ (4.19) можно расчленить, разбивая матрицу  $[A]$  на блоки, или клетки, например вида:

$$[A] = \begin{bmatrix} R & | & V \\ \hline - & | & - \\ W & | & S \end{bmatrix}$$

где  $[R]$  и  $[S]$  – квадратные матрицы;  $[W]$  и  $[V]$  – прямоугольные матрицы.

Если разложение (7.28) существует, то матрицы имеют вид:

$$[L] = \begin{bmatrix} L_R & | & 0 \\ \hline - & | & - \\ L_W & | & L_S \end{bmatrix}; \quad [U] = \begin{bmatrix} U_R & | & U_U \\ \hline 0 & | & - \\ 0 & | & U_S \end{bmatrix}.$$

Легко показать, что

$$\begin{aligned} [R] &= [L_R] \times [U_R]; \\ [S] - [W][R]^{-1}[V] &= [L_S] \times [U_S]. \end{aligned}$$

Таким образом, задача сведена к  $LU$ -разложению матрицы  $[R]$ , ее обращению и  $LU$ -разложению матрицы  $[S] - [W] \times [R]^{-1}[V]$ . Обращение матрицы  $[A]$  заменяют обращением двух матриц меньшего размера (например, половинного). Процедура может выполняться рекурсивно.

## 7.4. МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ ИНФОРМАЦИОННО-РАЗРЕЖЕННЫХ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

### 7.4.1. Диакоптический метод

Диакоптика – направление в исследовании сложных систем, суть которого заключается в декомпозиции системы на подсистемы, или части, и ее анализе по частям при отображении в ММ системы всех имеющихся связей между выделенными подсистемами. При этом решение одной задачи большой размерности заменяется решением последовательности задач меньшей размерности.

Если объем вычислений зависит сверхлинейно от размерности задачи, то диакоптический метод дает сокращение затрат машинного времени. Кроме того, если для решения задачи имеющегося объема памяти ОЗУ недостаточно, то диакоптический метод позволяет экономным образом организовать обмен информацией между ОЗУ и ВЗУ, минимизируя число таких обменов.

Дополнительные преимущества диакоптических методов обусловлены тем, что диакоптика по своей сути является аппаратом распараллеливания вычислений, что при использовании многопроцессорных параллельных вычислительных систем (ВС) позволяет осуществлять дальнейшее сокращение затрат машинного времени при анализе сложных систем.

Декомпозиция системы на  $(m - 1)$  подсистем приводит к тому, что переменные решаемой задачи разбиваются на  $(m - 1)$  групп. Каждая из первых  $(m - 1)$  групп включает внутренние переменные, характеризующие состояние соответствующей подсистемы при разорванных связях с другими подсистемами. Переменные последней группы характеризуют связи между подсистемами.

Формально диакоптический метод применительно к моделированию сложных систем основан на возможности представления матрицы уравнений системы в виде одной из СБКФ – блочно-диагональной с двойным окаймлением (БДДО):

$$\begin{bmatrix} A_1^1 & & & \\ & \vdots & & \\ & & A_3 & \\ \hline & & & \\ & & & \\ \hline & A_4^i & & \\ \hline & & A_2 & \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1^1 \\ x_1^2 \\ \vdots \\ x_1^i \\ x_e \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \end{bmatrix}, \quad (7.34)$$

где диагональные блоки  $[A_1^i]$  соответствуют уравнениям отдельных подсистем с переменными  $x_1^i$ , а матрица  $[A_3^i]$  учитывает влияние на каждую из подсистем переменных связи  $x_i$ , которые, в свою очередь, через матрицу  $[A_4]$  связаны с переменными подсистем. Выделить переменные связи  $x_i$  в сложной системе и получить уравнения в виде (7.34) можно разными способами, в частности с использованием СТГ при анализе гидравлических и тепловых процессов ХТС (см. раздел 4.7).

Решение СЛАУ (7.34) сводится к предварительному получению и решению уравнений меньшей размерности относительно переменных связи

$$[A^*] [X] = [b^*], \quad (7.35)$$

затем переменные каждой подсистемы  $x_1^i$  определяются из решения (7.34). Рассмотрим способ получения уравнения переменных связи (7.35) на основе решения общей СЛАУ (7.34). В этом случае общую матрицу  $[A]$  системы записывают в виде:

$$[A] = [\hat{A}] + [C] [D] + [D]^T [D]. \quad (7.36)$$

где

$$[\hat{A}] = \begin{bmatrix} A_1 & 0 \\ A_4 & E \end{bmatrix}; \quad [C] = \begin{bmatrix} A_3 \\ A_2 \end{bmatrix}; \quad [D] = \begin{bmatrix} 0 \\ I \end{bmatrix} \quad (7.37)$$

Далее  $(m+1)$  раз ( $m$ -размерность вектора переменных связи  $x_2$ ) решается СЛАУ с треугольной матрицей:

$$[\hat{A}] [X^j] = [B^j], \quad j = 0, 1, \dots, m, \quad (7.38)$$

где  $[B^j] = [B^0] = [b]$  и  $[B^j] = [C^j]$ ,  $j = \overline{1, m}$ ;  $[C^j]$ — $j$ -й столбец матрицы  $[C]$ .

Столбцы матрицы  $[A^*]$  и  $[b^*]$  в (7.35) набираются процедурой

$$\left. \begin{array}{l} [A^*] = [D_x^1, D_x^2, \dots, D_x^m] = [x^{(1)}, x^{(2)}, \dots, x^m]; \\ [b^*] = [D] [X^0] = [X^0]. \end{array} \right\} \quad (7.39)$$

В результате решения (7.35) находят переменные всех подсистем:

$$x_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{1,ij} x_{1j} - \sum_{r=1}^m a_{3,ir} x_{cr}, \quad i = 1, 2, \dots, n-m, \quad (7.40)$$

где  $a_{1,ij}$  и  $a_{3,ir}$ —элементы матриц  $[A_1]$  и  $[A_3]$  из выражения (7.34).

Рассмотрим диакоптический метод решения на примере следующей СЛАУ:

$$\left[ \begin{array}{cc|c} 1 & & 2 \\ 2 & & 1 \\ 2 & 2 & | \\ 1 & 1 & | \\ 1 & 3 & 2 \\ \hline - & 4 & 2 \end{array} \right] \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \\ x_6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \\ - \\ - \\ 1 \end{bmatrix},$$

откуда

$$[\tilde{A}] = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & 2 & & & & 0 \\ & & 2 & & & \\ 1 & & & 1 & & \\ 1 & & & & 2 & \\ \hline 1 & 3 & & & 2 & \\ \hline 4 & 2 & & & 1 & \end{bmatrix}; \quad [C] = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ \hline \end{bmatrix}.$$

Решая дважды систему уравнений, аналогичную (7.38), с разными правыми частями, получают следующие результаты:

$$\begin{aligned} x_1^0 &= 2; & x_2^0 &= 1/2; & x_3^0 &= (3 - 2x_2^0)/2 = 1; & x_4^0 &= -x_1^0 = -2; \\ x_5^0 &= (-x_1^0 - 3x_2^0)/2 = -7/4; & x_6^0 &= 1 - 4x_3^0 - 2x_4^0 = 1; \\ x'_1 &= 2; & x'_2 &= 1/2; & x'_3 &= -1/2; & x'_4 &= -2; & x'_5 &= -7/4; & x'_6 &= 6. \end{aligned}$$

Используя вспомогательную матрицу  $[D] = [000001]$ , формируют уравнения (7.35) при помощи соотношений (7.36)  $6x_6 = 1$ , откуда  $x_6 = 1/6$ .

В соответствии с (7.40) для остальных переменных находят следующие значения:

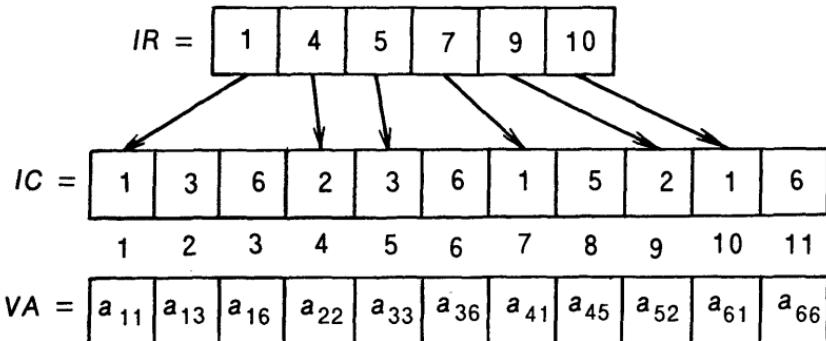
$$\begin{aligned} x_1 &= 2 - 2x_6 = 5/3; & x_2 &= (1 - x_6)/2 = 5/12; \\ x_3 &= (3 - 2x_2)/2 = 13/12; & x_4 &= -x_1 = -5/3; \\ x_5 &= (-x_1 - 3x_2)/2 = -35/24. \end{aligned}$$

#### 7.4.2. Методы упорядочения информационно-разреженных систем уравнений

Одна из упакованных форм хранения разреженных матриц представляет собой три кодирующих списочных массива: массив элементов  $VA$ , содержащий значения ненулевых элементов (НЭ) матрицы; массив столбцов  $IC$ , содержащий порядковые индексы столбцов НЭ; массив строк  $IR$ , в каждой ячейке этого массива указывают номер ячейки массива  $IC$ , с которой начинается информация о НЭ данной строки, причем разность таких соседних ячеек  $\{IR(i+1) - IR(i)\}$  соответствует числу НЭ в  $i$ -й строке. Например, для матрицы

$$[A] = \begin{bmatrix} a_{11} & & a_{13} & & & a_{16} \\ & a_{22} & & & & \\ & & a_{33} & & & a_{36} \\ a_{41} & & & & a_{45} & \\ & a_{52} & & & & \\ a_{61} & & & & & a_{66} \end{bmatrix}$$

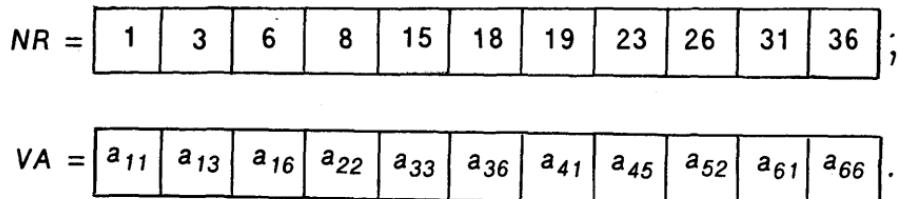
кодирующие списочные массивы имеют вид:



Применяют также позиционное кодирование, когда каждому элементу матрицы присваивается только один номер (индекс), например по строкам:

1	2	...	...	$n$
$n + 1$	$n + 2$	...	...	$2n$
$2n + 1$	$2n + 2$	...	...	$3n$
...	...	...	...	...
$n^2 - n + 1$	...	...	...	$n^2$

В этом случае разреженная матрица представляется двумя массивами: массивом НЭ *VA* и массивом номеров НЭ – *NR*. Например для приведенной матрицы 6-го порядка



Дополнительно к рассмотренным формам применительно к процедуре *LU*-преобразования используется кодировка по способу строк и столбцов. В этом случае массив *IC* имеет индексы строк НЭ матрицы [*L*] и индексы столбцов НЭ матрицы [*U*], а в массиве *VA* последовательно размещаются НЭ столбцов матрицы [*L*] и строк матрицы [*U*]. Границы участков массивов *IC* и *VA*, соответствующие НЭ отдельных столбцов матрицы [*L*] и НЭ отдельных строк матрицы [*U*], фиксируются в массиве *IR*, длина которого увеличивается вдвое по сравнению с длиной при других способах кодировки. Дополнительно формируется массив

*IVA* с указанием номеров ячеек массива *VA*, содержимое которых изменяется в процессе *LU*-преобразования матрицы  $[A]$ .

Измененная форма упаковки матрицы, согласованная с последовательностью процесса *LU*-преобразования, обеспечивает отсутствие логических операций и процедур поиска обрабатываемых НЭ на каждом шаге вычислений. Формируемые элементы матрицы  $[L]$  и  $[U]$  записываются на позиции обработанных элементов матрицы  $[A]$ , что экономит массив используемой памяти.

Необходимость принятия специальных мер для сохранения разреженной СЛАУ в процессе ее решения объясняется тем, что при *LU*-преобразовании матрицы  $[A]$  возможно появление новых ненулевых элементов (ННЭ) и их число зависит от того, какие из элементов матрицы  $[A]$  и в какой последовательности выбраны в качестве главных.

При многократном решении (4.19) процесс *LU*-преобразования целесообразно построить так, чтобы по возможности уменьшить число ННЭ и изменений в исходных ненулевых элементах (ИНЭ). Таким образом сокращается число арифметических операций при решении СЛАУ (4.19), а значит повышается точность решения и уменьшаются затраты памяти, необходимые для хранения информации о системе уравнений (4.19) и (7.3). Оптимизация процесса *LU*-преобразования достигается предварительным упорядочением информационной структуры решаемой СЛАУ.

С применением как аппарата теории графов, так и различных стратегий выбора главного элемента матрицы существует большое число стратегий упорядочения информационно разреженной структуры СЛАУ, представляющих собой  $n$ -шаговую процедуру, каждый шаг которой включает: выбор из элементов матрицы  $[A]$  текущего главного элемента, удовлетворяющего критерию упорядочения и условиям численной устойчивости; перестановку строк и столбцов матрицы  $[A]$  так, чтобы выбранные главные элементы лежали по главной диагонали; анализ полученной ненулевой структуры для определения позиций ННЭ и проведение соответствующей коррекции информационных массивов.

Перестановка строк и столбцов может выполняться и многократно после определения главных элементов, причем на каждом шаге упорядочения новые номера строк и столбцов запоминаются в специальных векторах перестановок.

Одним из наиболее распространенных критерииев упорядочения разреженных СЛАУ является критерий Марковица, в соответствии с которым главный элемент выбирается на пересечении тех строк и столбцов матрицы, среди которых главный элемент еще не выбирался, и которому соответствует минимальный вес  $\omega_{ij}$ :

$$\omega_{ij} = \min_{ij} [(c_i - 1)(r_j - 1)], \quad (7.41)$$

где  $r_j$ ,  $c_i$  – число НЭ в  $j$ -й строке и  $i$ -м столбце, расположенных в непреобразованной части упорядочиваемой матрицы  $[A]$ .

Вес  $\omega_{ij}$  соответствует максимальному числу ННЭ, которые могут появиться, если в качестве главного будет выбран элемент  $a_{ij}$ .

При упорядочении СЛАУ трудно обеспечить выполнение условий вычислительной устойчивости, связанных с выбором для каждого шага  $LU$ -преобразования в качестве главного элемента наибольшего по абсолютному значению элемента некоторого столбца (строки) из непреобразованной еще части матрицы  $[A]$ . Это объясняется, с одной стороны, противоречивостью требований сохранения разреженности матрицы  $[A]$  и условий вычислительной устойчивости и, с другой стороны, сложностью предварительной оценки величин, изменяющихся в процессе вычислений элементов матрицы. Поэтому на практике ограничиваются контролем величины главных элементов упорядочиваемой СЛАУ, стремясь к тому, чтобы все выбранные в качестве главных элементы были больше некоторого минимально допустимого для них значения. При этом на каждом шаге упорядочения выделяемый по критерию (7.41) элемент проверяется по величине. Если величина элемента больше допустимого минимального значения, то он выбирается в качестве главного, в противном случае поиск продолжается.

При упорядочении уравнений СЛАУ учитываются их особенности. Например, если значения элементов главной диагонали матриц СЛАУ доминируют по величине в своих строках, то при выборе главных элементов даже при равных весах  $\omega_{ij}$  предпочтительнее диагональные элементы матриц.

При многократном решении уравнений (4.19) важно учитывать не только разреженность их матриц, но и частоту изменения элементов этих матриц.

#### 7.4.3. Метод прогонки

Этот метод является разновидностью метода Гаусса для решения системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с трехдиагональной (ленточной) матрицей, которые характерны для ТО диффузационного разделения. Вычисления по методу Гаусса состоят из прямого и обратного ходов. При прямом ходе из уравнений последовательно исключают неизвестные, т. е. исходную систему приводят к виду, в котором матрица коэффициентов становится треугольной. Такое приведение основано на  $k$ -кратном применении формулы пересчета коэффициентов:

$$a_{ij} := a_{ij} - a_{ik}a_{kj}/a_{kk} \quad (7.42)$$

ко всем элементам матрицы коэффициентов с  $i > k$  и  $j > k$ ,  $k = 1, 2, \dots, (n-1)$ , где  $n$  – порядок системы уравнений. При пересчете столбец свободных членов рассматривают как  $(n+1)$ -й

столбец преобразуемой матрицы. Обратный ход заключается в вычислении неизвестных, начиная с определения из  $n$ -го уравнения единственной неизвестной  $x_n$ . Далее из  $(n-1)$ -го уравнения находят неизвестную  $x_{n-1}$ , так как в это уравнение кроме  $x_{n-1}$  входит только неизвестная  $x_n$ , значение которой к данному моменту вычислено, и т. д. вплоть до нахождения  $x_1$ .

Учет разреженности матрицы в методе при этом заключается в том, что арифметические действия по (7.42) не выполняют, если выполняется хотя бы одно из условий  $a_{ik} = 0$  или  $a_{kj} = 0$ .

Следует различать исходную и итоговую разреженность матрицы. Исходная разреженность определяется числом исходных ненулевых элементов (ИНЭ), имеющихся в матрице до начала исключений неизвестных по методу Гаусса. Однако в процессе вычислений по (7.42) некоторые коэффициенты  $a_{ij}$ , бывшие нулевыми, могут стать новыми ненулевыми элементами (ННЭ). Итоговая разреженность определяется суммарным числом ИНЭ и ННЭ, и эффективность учета разреженности матрицы тем выше, чем выше итоговая разреженность.

Итоговая разреженность  $S_{\text{ит}}$  матрицы зависит от ее исходной разреженности и от порядка, в каком расположены уравнения и неизвестные (строки и столбцы матрицы). Существует некоторый оптимальный порядок, при котором  $S_{\text{ит}}$  максимальна. Алгоритмы упорядочения строк и столбцов матрицы с целью максимизации  $S_{\text{ит}}$  имеют важное значение для эффективности вычислений и включаются в метод Гаусса. Один из простейших приближенных алгоритмов максимизации  $S_{\text{ит}}$  – это алгоритм, по которому строки матрицы  $[A]$  располагаются в порядке увеличения числа ИНЭ в них.

Рассмотрим сущность метода прогонки. Нетрудно заметить, что в трехдиагональных матрицах при исключении очередной неизвестной  $x_{i-1}$  из СНАУ пересчет по (7.42) следует производить только в отношении диагонального элемента  $a_{ii}$  и свободного члена  $i$ -го уравнения  $b_i$ . Обозначим преобразованные по (7.42) значения  $a_{ii}$  и  $b_i$  через  $r_i$  и  $q_i$  соответственно. Тогда прямой ход по методу Гаусса сводится к расчету коэффициентов  $r_i$  и  $q_i$ ,  $i = 2, 3, \dots, n$  по рекуррентным формулам, являющимся частными случаями (7.42):

$$r_i = a_{i,i} - a_{i,i-1}a_{i-1,i}/r_{i-1}; \quad q_i = b_i - a_{i,i-1}q_{i-1}/r_{i-1}.$$

Начальные значения коэффициентов  $r_1 = a_{11}$  и  $q_1 = b_1$ .

Обратный ход в методе прогонки также выполняют по очевидной рекуррентной формуле

$$x_i = (q_i - a_{i,i+1}x_{i+1})/r_i,$$

при этом принимают  $x_{n+1} = 0$ . Коэффициенты  $r_i$  и  $q_i$  называют прогоночными. В качестве прогоночных коэффициентов часто используют

$$l_i = -a_{i-1,i}/r_{i-1} \text{ и } p_i = q_{i-1}/r_{i-1},$$

тогда обратный ход осуществляют по формуле:

$$x_i = p_{i+1} + l_{i+1}x_{i+1}.$$

Алгоритмы метода прогонки в отличие от более общих алгоритмов учета разреженности матриц с нерегулярной структурой характеризуются большей простотой программной реализации.

## 7.5. ЭФФЕКТИВНОСТЬ РАЗЛИЧНЫХ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ ХТС

Эффективность метода решения систем алгебраических уравнений (АУ) зависит не только от особенностей самого метода, но и в не меньшей мере от особенностей решаемой задачи и характеристики используемой ЭВМ. Среди наиболее существенных особенностей задач, называемых ниже факторами, отметим размерность  $n$  (порядок системы уравнений), число обусловленности матрицы  $[A]$  — Ц и разреженность матрицы  $[S]$ , а среди характеристик ЭВМ — быстродействие Б, определенное для класса научно-технических задач, емкость ОЗУ и разрядность машинного слова.

Собственно выбор метода основан на установлении взаимосвязи между факторами и характеристиками ЭВМ, с одной стороны, и такими показателями эффективности применения метода, как время решения, вероятность получения правильного результата и его точность, с другой стороны.

Рассмотрим, как устанавливаются подобные взаимосвязи для основных методов решения систем АУ. Для этих методов:

$$T_m = n\gamma I/B,$$

где  $T_m$  — затраты машинного времени;  $n$  — порядок решаемой системы АУ, принимаемый за оценку сложности задачи;  $\gamma$  — среднее число арифметических операций, приходящихся на единицу сложности задачи, на одной итерации;  $I$  — среднее число итераций.

Для решения СЛАУ (4.19) выбирают либо метод Гаусса, либо итерационные методы.

Для метода Гаусса  $I = 1$ , и если не учитывать разреженность матрицы коэффициентов  $[A]$ , то  $\gamma \approx 2(n^2/3 + 2n)$ . Неучет разреженности ограничивает целесообразность применения метода Гаусса решением задач только невысокой размерности.

При  $n > 50$  учет разреженности становится необходимым. Для метода Гаусса при учете разреженности и оптимальном упорядочении строк и столбцов матрицы  $[A]$  в задачах исследования ХТС имеем  $\gamma = \text{const}$ . Так, для распределенных моделей с трехдиагональной матрицей коэффициентов при применении метода прогонки  $\gamma \approx 8$ .

Для решения СЛАУ итерационными методами с учетом разреженности матрицы коэффициентов:  $I > 1$ , а  $\gamma = 2Qn$ , где  $Q = 1 - S$  — насыщенность матрицы. Так как  $Q = K/n$ , где  $K$  —

среднее арифметическое для числа ННЭ в одной строке матрицы  $[A]$ , величина  $\gamma = 2K$ . Так, для моделей с  $\gamma \approx 7,8$  одна итерация выполняется быстрее, чем по методу Гаусса. Однако из-за того, что  $I \gg 1$ , итерационные методы по показателю  $T_m$  практически всегда проигрывают методу Гаусса.

Решение СНАУ выполняется итерационными методами, при этом на требуемое число итераций  $I$  в методе Ньютона решающее влияние оказывает выбор начального приближения, а в остальных итерационных методах – число обусловленности  $\bar{C}$  матрицы  $[J]$  решаемой СНАУ.

В методе Ньютона, применяемом в рамках методов установления или продолжения решения по параметру,  $I$  обычно не превышает трех. Когда  $I$  превышает некоторый порог  $I_{np}$  (например,  $I_{np} = 7$ ), лучше уменьшать значения коэффициентов, управляющих процессом установления, чем продолжать итерации при  $I > I_{np}$ . Следует отметить, что при решении СНАУ величина  $\gamma$  растет, так как при ее подсчете должны быть учтены затраты на вычисление элементов матрицы  $[J]$ .

В методе простых итераций  $I$  может достигать неприемлемо больших значений, поэтому целесообразно ввести на  $I$  ограничение  $I_{rp}$  сверху. Если принять  $I_{rp} = 1,5 \cdot 10^4$ , то из соотношения  $I_{rp} = -0,5\bar{C}\lg \varepsilon$  при  $\varepsilon = 10^{-3}$  получаем, что метод простых итераций можно применять только к решению СУ, матрица  $[J]$  которых имеет  $\bar{C} < 10^4$ .

Эффективность метода решения систем АУ определяется также затратами памяти ОЗУ. При неучете разреженности только на хранение матрицы Якоби нужно  $n^2$  ячеек памяти, поэтому если для одного слова используется 8 байт, то при  $n = 100$  для хранения требуется 80 кбайт, а при  $n = 500$  – уже 2 Мбайт. Итак, подтверждается вывод о необходимости учета разреженности при решении задач с  $n > n_{np}$ , где  $n_{np}$  зависит от характеристик используемых ЭВМ и, как правило, составляет несколько десятков. В задачах анализа распределенных моделей, в которых  $n$  может превышать  $10^4$ , эффективность метода по затратам машинной памяти становится одной из важнейших характеристик. В таких случаях применяют либо релаксационные методы, либо метод Ньютона с использованием на каждой итерации метода Гаусса, но в рамках рассмотренного диакоптического метода (см. раздел 7.4.1).

На точность решения задачи оказывают влияние задаваемые пользователем в исходных данных допустимые погрешности  $\varepsilon_1$  или  $\varepsilon_2$ , а также обусловленность СУ. Однако задаваемые значения  $\varepsilon_1$  или  $\varepsilon_2$  могут вообще оказаться недостижимыми или из-за необходимости, или из-за слишком медленной сходимости вычислений.

## 7.6. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И КЛАССИФИКАЦИЯ МЕТОДОВ ОПТИМИЗАЦИИ ХТС

Математическая постановка задачи оптимизации ХТС, которая возникает при эксплуатации, реконструкции и проектировании химических производств (см. разделы 1.9 и 1.10) в общем случае представляет собой следующую задачу нелинейного программирования (ЗНП): для ХТС с заданной топологией  $G$  при известных ММ каждого  $k$ -го элемента определить оптимальные значения вектора управлений  $\bar{U}^{*(k)}$  и вектора переменных состояния  $\tilde{Y}^{*(k)}$ , для которых КЭ системы (2.17) принимает экстремальное значение:

$$\psi^*(\bar{U}^{*(k)}, \tilde{Y}^{*(k)}) = \underset{\substack{\sum \\ \bar{U}^{(k)}, \tilde{Y}^{(k)}}}{\text{extr}} \sum_{k=1}^N \psi^k(\bar{U}^{(k)}, \tilde{Y}^{(k)}) \quad (7.43)$$

при выполнении уравнений математической модели ХТС (2.1) и (2.2), или (2.3) и (2.4), а также ограничений на управляющие переменные каждого  $k$ -го элемента ХТС (2.11) и (2.13).

Методика решения многомерной задачи оптимизации ХТС (7.43), (2.1), (2.2), (2.11) и (2.13) состоит из следующих этапов:

- 1) общий анализ задачи оптимизации ХТС;
- 2) выбор вида КЭ;
- 3) выбор оптимизирующих переменных и анализ их влияния на КЭ;
- 4) составление математической модели ХТС;
- 5) разработка оптимальной стратегии решения задачи оптимизации ХТС;
- 6) выбор метода решения задачи поиска экстремального значения КЭ и расчет оптимальных значений управляющих переменных;
- 7) анализ чувствительности величины экстремума КЭ и коррекция результатов оптимизации.

Приведенная последовательность этапов достаточно условна. К тому же возможна параллельная работа по нескольким этапам, возвращение к уже пройденным с целью корректировки их результатов и т. д. Кратко рассмотрим характеристику каждого этапа решения задачи оптимизации ХТС.

Этап 1 предполагает осуществление предварительного общего анализа задачи оптимизации на основе изучения возможных вариантов технологической топологии ХТС, выяснения типа задачи оптимизации (статическая, динамическая или квазистатическая) и т. п. Если ставится задача выбора оптимальной технологической схемы ХТС, последующие этапы должны рассматриваться применительно к каждому из альтернативных вариантов схемы.

Этап 2 позволяет количественно оценить основную цель функционирования ХТС. При выборе вида КЭ (см. разделы 1.6

и 1.9) нужно учитывать связи данной системы с другими ХТС. Существенными вопросами, возникающими на этом этапе, являются формирование локальных КЭ для элементов (подсистем) и учет их взаимосвязи с глобальным КЭ системы.

Этап 3 предназначен для исследования возможного качественного влияния оптимизирующих переменных на выбранный КЭ системы. Здесь важно учесть все существенные для оптимизации переменные и исключить несущественные, что дает возможность снизить размерность общей задачи. При выборе оптимизирующих переменных необходимо учитывать все ограничения, накладываемые на переменные ХТС, так как оптимальное решение не может принадлежать границе области допустимых значений той или иной переменной.

Выполнение этапов 1–3 позволяет сформулировать содержательную, или инженерно-технологическую постановку задачи оптимизации ХТС и затем перейти к математической постановке этой задачи.

Этап 4 связан с решением вопросов выбора формы представления ММ (1.2) элементов ХТС, а также с определением необходимой точности той или иной ММ, что связано с неравнозначным влиянием оптимизирующих переменных того или иного элемента на КЭ системы в целом.

Этап 5 позволяет минимизировать трудоемкость вычислительных процедур при определении либо оптимальной топологии ХТС, либо оптимальных режимов работы ХТС. Решение задачи оптимизации ХТС в общем случае сводится к многократному расчету системы. Поэтому совершенно ясно, какое важное значение приобретает при разработке стратегии решения задачи оптимизации ХТС использование алгоритмов оптимальной стратегии анализа ХТС на основе различных классов топологических моделей (см. гл. 6).

Этап 6 обеспечивает практическую реализацию на ЭВМ алгоритмов, соответствующих выбранной стратегии решения задачи оптимизации и методу поиска экстремума КЭ. В конечном итоге этот этап дает информацию об оптимальном состоянии, или технологическом режиме системы.

Этап 7 позволяет количественно определить влияние величины изменения оптимизирующих переменных на значение КЭ. Необходимость осуществления этого этапа обусловлена следующими двумя обстоятельствами. Во-первых, полученный режим ХТС может относиться к области высокой параметрической чувствительности КЭ к изменению параметров системы, что приводит к трудности при его практической реализации. Во-вторых, принятые допущения и загрузления при построении ММ системы могут привести к отклонению параметров системы от своих заданных значений при реализации оптимального режима. Поэтому необходима корректировка оптимального решения с использованием методов теории чувствительности (см. разделы 1.7

и 5.3) с целью компенсации неучтенных влияний и побочных факторов.

Для решения задач оптимизации ХТС используются два класса методов: композиционные и декомпозиционные. Композиционные методы оптимизации не учитывают особенности технологической и информационной топологии ХТС и основаны на применении для отыскания экстремума КЭ (2.17) ХТС как прямых методов (или методов спуска), так и непрямых методов, которые позволяют определить оптимальные решения с помощью необходимых условий существования экстремума. При использовании композиционных методов ХТС рассматривается как единое целое, без выделения отдельных элементов или подсистем. Очевидно, что композиционным методам соответствует использование информационного принципа анализа ХТС (см. раздел 2.4).

Декомпозиционные методы оптимизации основаны на декомпозиции исходной многомерной задачи оптимизации ХТС на совокупность подзадач оптимизации отдельных элементов (подсистем) ХТС, входящих в данную ХТС, и на координационном согласовании результатов решения задач оптимизации для отдельных элементов (подсистем) с учетом их структурных взаимосвязей в системе. Очевидно, что декомпозиционным методам оптимизации ХТС соответствует использование блочного принципа анализа ХТС (см. раздел 2.5).

В общем случае композиционные методы по характеру вычислительных операций представляют собой сложные итерационные процедуры решения ЗНП при наличии или без наличия ограничений различного типа.

Кратко рассмотрим общую характеристику прямых методов поиска экстремума КЭ в отсутствие ограничений типа равенств и неравенств, когда все оптимизирующие переменные  $u_i$  независимы и поиск можно осуществлять в пространстве управлений. Трудоемкость каждого прямого метода характеризуется двумя показателями: 1) объемом вычислений на каждой итерации; 2) стратегией поиска. По объему вычислений прямые методы подразделяют на три группы: а) методы, которые требуют вычисления только значений КЭ; б) методы, требующие вычисления как значений КЭ, так и его первых производных; в) методы, требующие вычисления первых и вторых производных КЭ.

Исходя из стратегии поиска, к первой группе относят метод Гаусса–Зейделя, симплекс-метод и др. Методы второй группы – это метод градиента, наискорейшего спуска и их модификации. Методы третьей группы основаны на аппроксимации КЭ в окрестности рабочей точки квадратичной формой.

Поскольку вычисление вторых производных численными методами неточно и требует больших затрат времени ЭВМ, а полу-

чение аналитических выражений очень трудоемко, при оптимизации ХТС применяют ряд методов, в которых используются только первые производные, но по скорости сходимости эти методы превосходят градиентные.

При наличии ограничений на оптимизирующую переменную  $i$ , типа равенств и неравенств для решения задачи оптимизации ХТС применяют либо методы штрафных функций, позволяющие формально свести задачу с ограничениями к задаче без ограничений, либо методы проектирования градиента. Методы штрафных функций, несмотря на кажущуюся простоту, имеют существенный недостаток – КЭ при достаточно большом коэффициенте штрафа имеет «овраг». Методы проектирования градиента в некоторых случаях дают хорошие результаты, однако скорость сходимости этих методов, как правило, невелика. При оптимизации ХТС для решения ЗНП широко применяют метод неопределенных множителей Лагранжа.

Рассмотрим характеристику *непрямых методов оптимизации* ХТС, к которым относятся метод вариационного исчисления, принцип максимума, метод Ньютона, метод Вольфа, метод простой итерации и другие методы решения нелинейных ДУ.

При использовании непрямых методов задачи оптимизации ХТС сводятся к решению своеобразной краевой задачи. Чтобы решать краевые задачи для системы ОДУ, чаще всего применяют методы Ньютона, Вольфа, квазилинеаризации и метод итераций в пространстве управлений. Однако краевая задача для уравнений принципа максимума имеет ряд особенностей, которые требуют специальных подходов. Из методов решения краевых задач наиболее простым является метод итераций в пространстве управлений, который в отдельных случаях может или плохо сходиться, или вообще расходиться.

К классу декомпозиционных методов оптимизации ХТС относятся многоуровневые методы и метод динамического программирования.

Рассмотрим стратегию многоуровневых методов оптимизации ХТС. При использовании многоуровневых методов задача оптимизации ХТС решается, как правило, на двух уровнях. На первом, или нижнем уровне отдельные подсистемы (элементы ХТС) оптимизируются независимо одна от другой. На втором, или верхнем уровне осуществляется координация оптимальных решений, полученных для отдельных подсистем, с целью достижения оптимума КЭ данной ХТС.

Необходимо отметить основной недостаток многоуровневых методов: эти методы в общем позволяют отыскать не оптимальную, а стационарную точку. Однако практически это ограничение не является весьма существенным недостатком по следующим причинам: 1) обычно функциональные зависимости для КЭ (2.17) ХТС с непрерывными ХП относятся к классу вогнутых функ-

ций; 2) если существуют локально-оптимальные решения, то они, как правило, практически используются как результат оптимизации.

Многоуровневые методы имеют следующие преимущества: 1) задача оптимизации большой размерности сводится к ряду взаимосвязанных задач меньшей размерности; 2) при оптимизации отдельных элементов ХТС можно использовать разные наиболее подходящие в том или ином случае методы и инженерно-технологические предпосылки.

## 7.7. ДВУХУРОВНЕВЫЕ МЕТОДЫ ОПТИМИЗАЦИИ СЛОЖНЫХ ХТС

### 7.7.1. Общая стратегия двухуровневых методов

Информационная структура двухуровневых методов оптимизации ХТС, представленная на рис. 7.4, включает два уровня алгоритмов: координирующий (или центральный) алгоритм  $A$  верхнего уровня, обеспечивающий оптимизацию ХТС в целом, и локальные (или местные) алгоритмы  $A_k$  нижнего уровня, обеспечивающие оптимизацию каждого элемента (подсистемы) ХТС в отдельности.

Стратегия двухуровневых методов реализуется следующим образом. На  $i$ -й итерации решения задачи оптимизации ХТС координирующий алгоритм  $A$  посылает каждому местному алгоритму  $A_k$  некоторую совокупность параметров  $(\Omega_1^{(i)}, \dots, \Omega_{n_i}^{(i)})$ , выбираемых так, чтобы для  $k$ -го элемента (подсистемы) можно было бы сформировать локальный КЭ  $\psi_k$ .

Локальные алгоритмы  $A_k$  проводят оптимизацию отдельных элементов, используя значения КЭ  $\psi_k$  ( $k = 1, N$ ). Очевидно, что оптимальное значение локального КЭ  $\psi_k^*$ , полученное в результате оптимизации каждого отдельного элемента (подсистемы), зависит от величины  $\Omega_1^{(i)}, \dots, \Omega_{n_i}^{(i)}$ . После проведения оптимизации отдельно для каждого  $k$ -го элемента местные алгоритмы  $A_k$

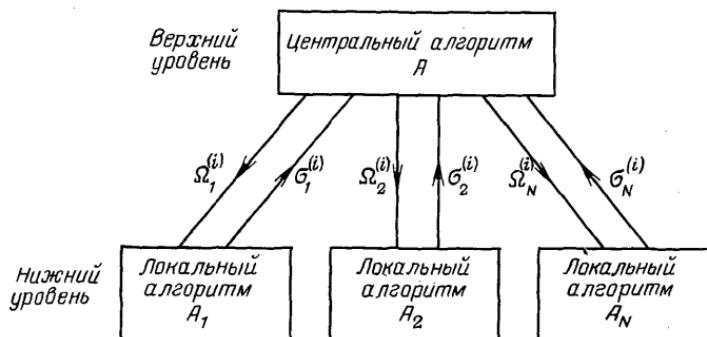


Рис. 7.4. Информационная структура двухуровневых методов оптимизации ХТС

отсылают результаты локальной оптимизации в виде некоторой совокупности параметров  $\sigma_1^{(i)}, \dots, \sigma_m^{(i)}$  обратно в координирующий алгоритм  $A$ . Центральный алгоритм  $A$  использует эту информацию для изменения множества значений  $\bar{\Omega}_k^{(i)}$  в соответствии с координацией взаимодействия элементов во всей ХТС. После этого при новых значениях  $\bar{\Omega}_k^{(i+1)}$  проводится  $(i+1)$  итерационная процедура.

Стратегия координации локальных оптимальных решений на верхнем уровне при оптимизации ХТС в целом может осуществляться с использованием двух классов методов: неявной декомпозиции ХТС и явной декомпозиции ХТС.

При использовании методов неявной декомпозиции выделяют отдельные элементы ХТС, разрывая технологические связи между элементами системы; заменяют реальные технологические связи между элементами некоторыми ценами на все переменные промежуточных технологических потоков  $\bar{\Omega}_k^{(i)}$ . Это позволяет написать автономный критерий оптимизации для каждого элемента и при фиксированных  $\bar{\Omega}_k^{(i)}$  проводить оптимизацию каждого элемента. В данном случае центральный алгоритм  $A$  посыпает в местные алгоритмы промежуточные цены на переменные ТП  $\bar{\Omega}_k^{(i)}$ . От местных алгоритмов  $A_k$  центральный алгоритм получает значения входных и выходных переменных  $\bar{x}_k$  и  $\bar{y}_k$ , полученные после оптимизации каждого элемента отдельно (в наших обозначениях  $\bar{\sigma}_k^{(i)}$ ). Центральный алгоритм, управляя промежуточными ценами  $\bar{\Omega}_k^{(i)}$ , должен согласовывать значения входных и выходных переменных соответствующих элементов  $\bar{\sigma}_k^{(i)}$ .

Иногда при использовании этих методов не учитывается одно важное обстоятельство. Можно показать, что методы неявной декомпозиции эквивалентны методу, использующему множители Лагранжа  $\bar{\lambda}_k$ , которым при этом соответствуют промежуточные цены  $\bar{\Omega}_k^{(i)}$ . Как известно, при фиксированных  $\bar{\lambda}_k$  надо искать стационарные точки Лагранжиана. Отсюда следует, что при использовании декомпозиционного метода при оптимизации каждого элемента ХТС следует искать не минимум функционала, а стационарную точку. В противном случае может быть получен неправильный результат.

При использовании методов явной декомпозиции выделяют отдельные элементы ХТС, присваивают разрываемым технологическим связям между элементами некоторые значения входных и выходных переменных для каждого элемента ХТС – значение векторов  $\bar{x}^{(k)}$  и  $\bar{y}^{(k)}$ .

Центральный алгоритм посыпает в местные алгоритмы значения входных и выходных переменных  $\bar{x}^k$  и  $\bar{y}^k$ . Местный алгоритм  $A_k$  проводит оптимизацию  $k$ -го элемента при фиксированных значениях входных и выходных переменных и посыпает в центральный алгоритм значение локального критерия  $\psi_k$ , полученное после локальной оптимизации элемента. Задача

центрального алгоритма состоит в том, чтобы, управляя всеми входными и выходными переменными элементов, установить оптимальный режим работы всей схемы.

К методам неявной декомпозиции относятся: метод цен и метод нереальных состояний; к методам явной декомпозиции – метод закрепления промежуточных переменных и метод реальных состояний.

Постановка задачи двухуровневой оптимизации ХТС имеет вид:

$$\underset{\bar{u}, \bar{y}}{\text{extr}} \psi(\bar{u}, \bar{y}) = \underset{\bar{u}, \bar{y}}{\text{extr}} \sum_{i=1}^N \psi_i^k(\bar{u}^{(k)}, \bar{y}^{(k)}) \quad (7.44)$$

при заданных ограничениях в виде СУ математических моделей отдельных элементов:

$$\bar{h}^{(k)}(\bar{u}^{(k)}, \bar{x}^k, \bar{y}^{(k)}) = 0 \quad (7.45)$$

и ограничениях, представляющих собой СУ структурных взаимосвязей между элементами

$$\bar{y}_i^{(k)} = \bar{f}_i^k(\bar{x}_i^{(p)}), \quad (7.46)$$

где  $\bar{x}_i^k$  – входные переменные,  $\bar{y}_i^k$  – выходные переменные  $i$ -го элемента подсистемы,  $\psi$  – КЭ данной ХТС в целом;  $\psi^{(k)}$  – КЭ  $k$ -го элемента;  $i = 1, N$  – число элементов.

Используя двухуровневые методы для решения задачи оптимизации ХТС, в начале необходимо записать выражение для функции Лагранжа, которая имеет вид:

$$\mathcal{L} = \sum_{k=1}^N \mathcal{L}^k = \sum_{k=1}^N \left\{ \psi^k(\bar{u}^{(k)}, \bar{x}^{(k)}, \bar{y}^{(k)}) + \bar{\lambda}^{\tau(k)} \bar{h}^{(k)}(\bar{u}^k, \bar{x}^k, \bar{y}^{(k)}) + \sum_i \bar{\pi}_i^{\tau(k)} (\bar{x}_i^{(k)} - \bar{f}_i(\bar{y}_i^{(p)})) \right\}, \quad (7.47)$$

где  $\bar{\lambda}_i^{\tau(k)}$ ,  $\bar{\pi}_i^{\tau(k)}$  – векторы неопределенных множителей Лагранжа;  $\tau$  – индекс транспонирования.

Необходимые условия существования оптимума для функции Лагранжа  $\mathcal{L}(\bar{x}^{(k)}, \bar{y}^{(k)}, \bar{\lambda}_i^{\tau}, \bar{\pi}_i^{\tau})$  имеют следующий вид:

$$\partial \mathcal{L}^{(k)} / \partial \bar{x}^{(k)} = \partial \psi^{(k)} / \partial \bar{x}^k + \partial \bar{h}^{(k)} / \partial \bar{x}^{(k)} |^\tau \bar{\lambda}^{(k)} - \sum_i \partial \bar{f}_i^{(k)} / \partial \bar{x}^{(k)} |^\tau \bar{\pi}_i = 0; \quad (7.48)$$

$$\partial \mathcal{L}^{(k)} / \partial \bar{y}^{(k)} = \partial \psi^{(k)} / \partial \bar{y}^{(k)} + \partial \bar{h}^{(k)} / \partial \bar{y}^{(k)} |^\tau \bar{\lambda}^{(k)} + \bar{\pi}_i = 0; \quad (7.49)$$

$$\partial \mathcal{L}^{(k)} / \partial \bar{\lambda}^{(k)} = \bar{h}_i(\bar{u}^{(k)}, \bar{y}^{(k)}) = 0; \quad (7.50)$$

$$\partial \mathcal{L}_i / \partial \bar{\pi}_i |^\tau = \bar{x}^{(k)} - \bar{f}_i(\bar{y}_i) = 0. \quad (7.51)$$

Чтобы согласовать оптимальные решения, полученные на нижнем уровне для отдельных элементов, с оптимальными решениями, получаемыми для ХТС в целом, теперь можно использовать как методы явной декомпозиции, так и методы неявной декомпозиции.

## 7.7.2. Метод закрепления промежуточных переменных

Рассмотрим сущность метода закрепления, представляющего собой один из методов явной декомпозиции. В этом методе промежуточные переменные  $\bar{x}^{(k)}$  и  $\bar{y}^{(k)}$ , обеспечивающие взаимосвязь между элементами ХТС, определяются на верхнем уровне, а постановка каждой  $k$ -й задачи оптимизации на нижнем уровне для отдельных элементов приводится к виду:

необходимо определить

$$\underset{\bar{u}^{(k)}, \bar{y}^{(k)}}{\text{extr}} \psi = \underset{\bar{y}^{(k)}}{\text{extr}} \sum_{k=1}^N \psi^{(k)}(\bar{u}^{(k)}, \bar{x}^{(k)}, \bar{y}^{(k)}) \quad (7.52)$$

при заданных ограничениях

$$\bar{h}^k(\bar{x}^{(k)}, \bar{y}^{(k)}) = 0; \quad (7.53)$$

$$\bar{y}_i^{(k)} = \bar{f}_i^{(k)}(\bar{x}_q^{(p)}), \quad (7.54)$$

где  $\bar{y}_i^{(k)}$  означают, что при решении задач оптимизации нижнего уровня эти промежуточные переменные являются постоянными величинами. Метод закрепления состоит из следующих этапов:

1) выбор некоторых фиксированных значений для величин промежуточных переменных  $\bar{y}^{(k)}$  на верхнем уровне решения задачи оптимизации ХТС в целом;

2) решение задачи оптимизации для каждого элемента на нижнем уровне в соответствии с уравнениями (7.53)–(7.54);

3) выполнение на  $(n+1)$  итерации коррекции величины на верхнем уровне таким образом, чтобы

$$\bar{y}_{n+1}^{(k)} = \bar{y}_n^{(k)} + \varepsilon \partial \mathcal{L}^{(k)} / \partial y^{(k)}, \quad (7.55)$$

где  $\varepsilon > 0$  – заданная величина шага по координируемой переменной;  $n$  – номер итерационной процедуры;  $\mathcal{L}^{(k)}$  – функция Лагранжа;

4) возврат ко второму этапу и продолжение итерационного процесса решения задачи оптимизации.

Заметим, что необходимым условием реализации метода закрепления является выполнение следующего соотношения:

$$\sum_{k=1}^N \dim \bar{y}^{(k)} < \dim \bar{u}^{(k)}, \quad (7.56)$$

где  $\dim$  – размерность вектора переменных;  $\bar{y}^{(k)}$  – вектор выходных переменных;  $\bar{u}^{(k)}$  – вектор управляющих переменных  $k$ -го элемента;  $k = \overline{1, N}$ .

Причем при выполнении равенства (7.56) задачи оптимизации на нижнем уровне не существуют, так как вектор  $\bar{u}^{(k)}$  определяется однозначно из (7.44)–(7.46).

### 7.7.3. Метод цен

При использовании метода цен на каждой итерационной процедуре решения задачи оптимизации ХТС уравнения структурных связей между элементами не выполняются. Метод цен включает следующие этапы:

1) выбор некоторых фиксированных значений величины цен для промежуточных переменных  $\bar{\pi}_i^{(k)}$  на верхнем уровне;

2) решение задачи оптимизации для каждого  $k$ -го элемента.

Необходимо определить:

$$\text{extr}_{\bar{x}^{(k)} \bar{y}^{(k)}} \left\{ \psi_i(\bar{u}^{(k)}, \bar{x}^{(k)}, \bar{y}^{(k)}) + \bar{\pi}_i^T \bar{y}^{(k)} - \sum_{p \neq k}^N \bar{\pi}_i^T \bar{f}_i^k(\bar{x}_q^{(p)}) \right\} \quad (7.57)$$

при выполнении следующих ограничений

$$\bar{h}^{(k)}(\bar{u}^{(k)}, \bar{x}^{(k)}, \bar{y}^{(k)}) = 0; \quad (7.58)$$

3) выполнение на  $(n+1)$  итерации коррекции величины  $\bar{\pi}_i^T$  на верхнем уровне таким образом, чтобы

$$\bar{\pi}_{n+1}^k = \bar{\pi}_n^{(k)} + \varepsilon \partial \mathcal{L}^{(k)} / \partial \bar{\pi}^{(k)},$$

где  $\varepsilon > 0$  – заданная величина шага по координируемой переменной;  $n$  – номер итерационной процедуры;  $\mathcal{L}^{(k)}$  – функция Лагранжа;

4) возврат ко 2-му этапу и продолжение итерационного процесса решения задачи оптимизации.

Подробно поясним сущность метода цен на примере задачи оптимизации одноконтурной ХТС, структурная схема которой показана на рис. 7.5, а.

Предполагают, что выходы элементов  $y_1, y_2, z_1$  и  $z_2$  являются непрерывными функциями входов  $u^{(1)}$  и  $u^{(2)}$ . Задача оптимизации состоит в определении таких значений  $u^{(1)}$  и  $u^{(2)}$ , которые позволяют максимизировать функцию прибыли обоих элементов, т. е. максимизировать:

$$\psi = \psi^{(1)}(u^{(1)}, x^{(1)}) + \psi^{(2)}(u^{(2)}, x^{(2)}) \quad (7.59)$$

при следующих условиях:

$$\left. \begin{array}{l} a) x^{(1)} = y^{(2)}(u^{(2)}, x^{(2)}) \\ b) x^{(2)} = y^{(1)}(u^{(1)}, x^{(1)}) \\ c) u^{(1)}, u^{(2)} \in U \end{array} \right\}, \quad (7.60)$$

где  $\psi^{(1)}, \psi^{(2)}$  – прибыль, связанная с эксплуатацией  $i$ -го элемента;  $U$  – множество возможных входов.

Приведенную задачу оптимизации (7.59) и (7.60) далее называют основной, или задачей полной оптимизации. Принимают, что максимум  $\psi$  существует и находится в точках  $\hat{U}, \hat{X}$ :

$$\max \{ \psi^{(1)}(u^{(1)}, x^{(1)}) + \psi^{(2)}(u^{(2)}, x^{(2)}) \} = \psi^{(1)}(\hat{u}^{(1)}, \hat{x}^{(1)}) + \psi^{(2)}(\hat{u}^{(2)}, \hat{x}^{(2)}).$$

Декомпозицию задачи полной оптимизации на две малые задачи осуществляют путем разрыва двух ТП, соединяющих два

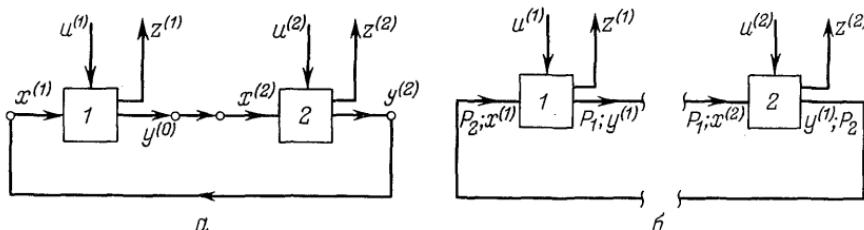


Рис. 7.5. Структурная схема одноконтурной ХТС (а) и пояснение сущности двухуровневого метода цен для решения задачи оптимизации ХТС (б)

элемента, как показано на рис. 7.5, б. Каждому из разрываемых ТП приписываются некоторые цены  $p_1$  и  $p_2$  (например, цены некоторых входного и выходного реагентов). Первый элемент поэтому оптимизируют, выбирая  $u^{(1)}$  и  $x^{(1)}$ . Формально можно записать локальные задачи оптимизации на нижнем уровне для каждого элемента.

*Подзадача I.* Найти:

$$\underset{u^{(1)}, x^{(1)} \in u_1}{\text{maximum}} \{ \psi^{(1)}(u^{(1)}, x^{(1)}) + p_1 y^{(1)}(u^{(1)}, x^{(1)}) - p_2 x^{(1)} \}; \quad (7.61)$$

*Подзадача II.* Найти:

$$\underset{u^{(2)}, x^{(2)} \in u_2}{\text{maximum}} \{ \psi^{(2)}(u^{(2)}, x^{(2)}) + p_2 y^{(2)}(u^{(2)}, x^{(2)}) - p_1 x^{(2)} \}; \quad (7.62)$$

где  $U = u_1 \cup u_2$ .

Ограниченные множества  $u_1$  и  $u_2$  заключают оптимизирующие переменные в реальные физические пределы и тем самым гарантируют, что максимумы подзадач существуют для любого множества цен  $P$ .

Решение подзадач I и II дает решение основной задачи, если цены  $p_1$  и  $p_2$  выбраны правильно. Выбор правильных цен является задачей верхнего уровня метода цен. На этом уровне выбираются цены так, чтобы свести разности  $(x^{(1)} - y^{(2)})$  и  $(x^{(2)} - y^{(1)})$  к нулю (тем самым удовлетворяется условие равенства переменных для одноименных ТП).

Алгоритм для подбора цен на верхнем уровне разрабатывают, исходя из выражения функции Лагранжа для основной задачи оптимизации (7.59) и (7.60):

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(U, X, P) \equiv & \psi^{(1)}(u^{(1)}, x^{(1)}) + \psi^{(2)}(u^{(2)}, x^{(2)}) + p_1 [y^{(1)}(u^{(1)}, x^{(1)}) - x^{(2)}] + \\ & + p_2 [y^{(2)}(u^{(2)}, x^{(2)}) - x^{(1)}] = \{\psi^{(1)} + p_1, y^{(1)} - p_2 x^{(1)}\} + \{\psi^{(2)} + p_2 y^{(2)} - p_1 x^{(2)}\}, \end{aligned} \quad (7.63)$$

где  $\mathcal{L}$  – функция Лагранжа основной задачи;  $p_1$  и  $p_2$  – множители Лагранжа (или цены).

Функцию Лагранжа (7.63) обычно используют для того, чтобы определить условия стационарности, которые справедли-

вы в оптимуме  $\psi$  основной задачи. Можно показать, что при относительно умеренных ограничениях необходимым и достаточным условием для основной задачи, которая должна быть оптимизирована, является максимизация функции Лагранжа в результате подбора  $u^{(1)}, x^{(1)}, u^{(2)}, x^{(2)}$ .

Задача оптимизации функции Лагранжа (7.63) разлагается на подзадачи I и II:

$$\begin{aligned} \max_{U, X, P} \mathcal{L}(U, X, P) = & \max_{u^{(1)}, x^{(1)}} \{\psi^{(1)} + p_1 y^{(1)} - p_2 x^{(1)}\} + \\ & + \max_{u^{(2)}, x^{(2)}} \{\psi^{(2)} + p_2 y^{(2)} - p_1 x^{(2)}\} \equiv \gamma(P). \end{aligned} \quad (7.64)$$

Так как максимум функции Лагранжа является функцией только множителя  $P$  и эта функция играет главную роль в дальнейшем, ей дано специальное название – *двойственная функция*, которую обозначают через  $\gamma(P)$ .

Ниже выводятся следующие свойства этой двойственной функции:

$$\gamma(p) \geq \psi^{(1)}(\hat{u}^{(1)}, \hat{x}^{(1)}) + \psi^{(2)}(\hat{u}^{(2)}, \hat{x}^{(2)}); \quad (7.65)$$

$$\min \gamma(p) = \psi^{(1)}(u^{(1)*}, x^{(1)*}) + \psi^{(2)}(u^{(2)*}, x^{(2)*}); \quad (7.66)$$

$$\partial \gamma / \partial p_1 = \partial \mathcal{L}(u^*, x^*) / \partial p_1 = y^{(1)}(u^{(1)*}, x^{(1)*}) - x^{(2)*}; \quad (7.67)$$

$$\partial \gamma / \partial p_2 = \partial \mathcal{L}(u^*, x^*) / \partial p_2 = y^{(2)}(u^{(2)*}, x^{(2)*}) - x^{(1)*}, \quad (7.68)$$

где  $u^*$  и  $x^*$  – значения  $u$  и  $x$ , которые обеспечивают максимумы (7.61) и (7.62).

Уравнение (7.66) справедливо только при специальных ограничениях, при которых основной оптимум может быть достигнут в результате подбора цен  $P$  так, чтобы максимизировать прибыль, достигаемую при оптимизации подзадач. Уравнение (7.66) констатирует далее, что градиенты двойственной функции представляют собой разность между количеством вещества, потребляемого одним элементом (например,  $x^{(2)*}$  для первого элемента), и количеством вещества (например,  $y^{(1)*}$ ), которое другой элемент может поставить по существующей цене. Таким образом, градиенты двойственной функции определяют при условии выполнения дополнительных вычислений, и задача подбора цены является задачей выпуклого программирования без ограничений. Оценку оптимальных цен можно получить, решая относительно  $p_1$  и  $p_2$  следующие линейные уравнения:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x^{(1)}} \psi^{(1)}(u^{(1)}, x^{(1)}) + p_1 \frac{\partial}{\partial x^{(1)}} y^{(1)}(u^{(1)}, x^{(1)}) - p_2 = 0 \\ \frac{\partial}{\partial x^{(2)}} \psi^{(2)}(u^{(2)}, x^{(2)}) + p_2 \frac{\partial}{\partial x^{(2)}} y^{(2)}(u^{(2)}, x^{(2)}) - p_1 = 0, \end{array} \right. \quad (7.69)$$

в которых все члены оценивают в точках, соответствующих возможным параметрам технологических режимов ХТС.

Отметим основные преимущества и особенности рассмотренных двухуровневых методов оптимизации ХТС:

1) основное преимущество декомпозиционных методов перед композиционными методами оптимизации – резкое снижение требуемого объема памяти ОЗУ на каждом этапе оптимизации;

2) к достоинствам метода цен и метода закрепления можно отнести возможность использования в качестве локальных алгоритмов оптимизации элементов ХТС различных прямых методов оптимизации, что позволяет наилучшим образом использовать преимущества того или иного метода поиска экстремума;

3) двухуровневые методы явной декомпозиции имеют следующее преимущество перед методами неявной декомпозиции: возможность практически использовать даже промежуточные результаты оптимизации ХТС, соответствующие улучшенному реальному технологическому режиму. В методах неявной декомпозиции практическую ценность результаты имеют только при абсолютной сходимости решения задачи оптимизации;

4) необходимость осуществления инверсии информационных переменных СУ математических моделей отдельных элементов ХТС и необходимость выполнения соотношения (7.56) для размерности векторов управлений и выходных переменных элементов в двухуровневых методах явной декомпозиции затрудняют их использование по сравнению с методами неявной декомпозиции.

## 7.8. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА СПЕЦИАЛЬНЫХ ПРОГРАММ ЦИФРОВОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ХТС

Проведение разнообразных научно-исследовательских работ по математическому моделированию, анализу и оптимизации ХТС в соответствии с методикой, изложенной в разделе 3.6, должен осуществлять коллектив ученых и инженеров, возможная организационная структура которого представлена на рис. 7.6.

Для выполнения вычислительных экспериментов по математическому моделированию, анализу и оптимизации ХТС используют специальные пакеты прикладных программ (ППП), которые в дальнейшем называются специальными программами цифрового моделирования (СПЦМ) ХТС. СПЦМ ХТС, как и любой ППП, строится на основе следующих принципов: блочность, адаптируемость, модифицируемость и расширяемость. Блок СПЦМ – это некоторая функционально законченная, независимо программируемая, тестируемая и отлаживаемая стандартная программа небольшого размера, по которой выполняется строго определенный вид обработки информации, и содержащая стандартные средства связи с другими программами.

В основу принципа блочности положено требование построения

ния любого ППП в виде многоуровневой иерархической системы блоков. Блочный принцип позволяет при сборке СПЦМ использовать блоки, составленные на различных алгоритмических языках.

СПЦМ функционирует под управлением основных операционных систем (ОС) и должна удовлетворять стандартным соглашениям, предъявленным этими ОС к программам. К ним относятся соглашения о передаче информации от одной программы к другой, о правилах образования задач и их приоритетах, соглашения об использовании ресурсов ЭВМ или информационно-вычислительных систем (ИВС), о связи с оператором, об управлении аварийными ситуациями, о способах доступа и управления данными и др. При разработке СПЦМ обычно используется трехступенчатая иерархия языков программирования, позволяющих автоматизировать процесс составления и отладки программ: внешний язык ЭВМ или ИВС, системный язык и машинный язык. Высшей ступенью внешних языков программирования является проблемно-ориентированный язык (ПОЯ).

Функционально-информационная структура типовой СПЦМ ХТС состоит из восьми блоков (рис. 7.7).

Кратко рассмотрим назначение и режимы функционирования основных блоков СПЦМ ХТС.

Блок *B1* содержит транслятор некоторого ПОЯ, на котором ЛПР осуществляет общение с ЭВМ и вводит необходимую информацию. ПОЯ должен быть достаточно удобным средством связи ЛПР с ЭВМ и, используя фразы ограниченного естественного языка (ОЕЯ), обеспечивать эффективную обработку больших массивов информации; позволять накапливать названия

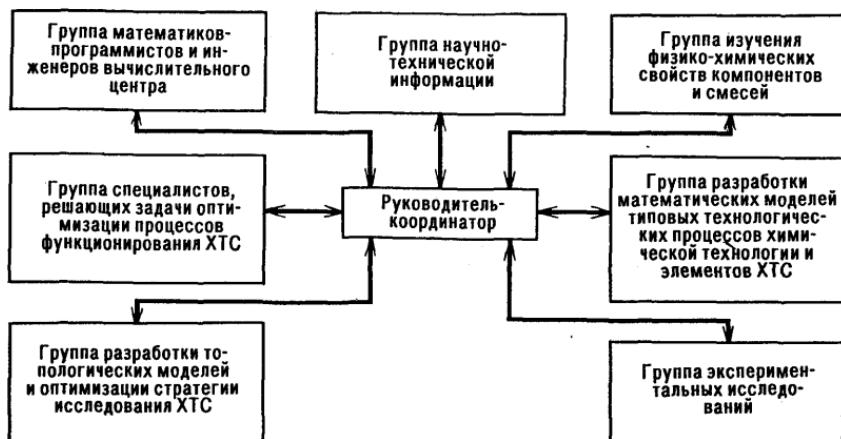


Рис. 7.6. Организация работы научно-исследовательского коллектива при решении задач математического моделирования различных ХТС

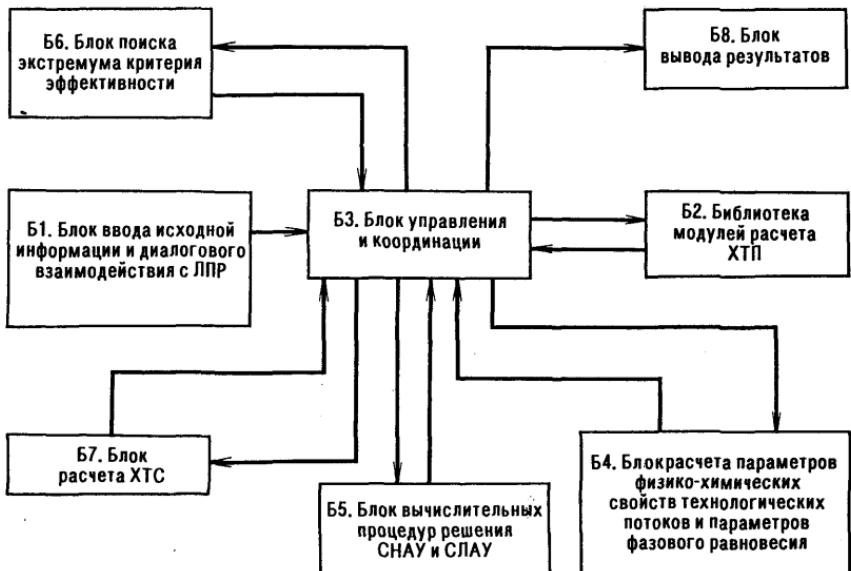


Рис. 7.7. Функционально-информационная структура типовой специальной программы цифрового моделирования ХТС

документов, хранить и выдавать их содержание; допускать однозначное использование тех или иных записей и т. д.

Для создания ПОЯ необходимо проанализировать научно-техническую документацию, используемую при исследовании ХТС, осуществить семантико-математический анализ научно-технических текстов; выбрать элементарную лексическую единицу (степень детализации терминов, от которой зависит более грубый или тонкий характер поиска); осуществить кодирование символов языков, их экспериментальную проверку и доработку. Необходимо особо подчеркнуть, что при использовании ПОЯ исследователю (ЛПР) не требуется никаких специальных знаний по программированию, не требуется знаний структуры ЭВМ или ИВС, о составе используемых в ней аппаратурных устройствах и о том, на какой ЭВМ или на каких аппаратурных устройствах ВС будет реализована какая-нибудь часть поставленной ЛПР задачи, либо разработанного им алгоритма.

Исходная информация СПЦМ включает информацию о технологической и информационной топологии ХТС (см. разделы 1.3 и 3.1); данные о производительности, о составе и физических свойствах потоков сырья, продуктов и полупродуктов; информацию о технологических и конструкционных параметрах элементов и о параметрах технологических режимов ХТС; информацию о требуемой точности результатов моделирования.

Для описания технологической топологии ХТС в некоторых

СПЦМ используют ППГ с систематической нумерацией всех ветвей и вершин, которая отображает стратегию расчета ХТС. Такой способ является довольно негибким при необходимости исследовать влияния на функционирование ХТС изменения структуры технологических связей между элементами. Более совершенен такой способ описания технологической топологии, когда для ППГ отдельно нумеруют входные и выходные потоки каждого элемента, а технологические связи задают при помощи матрицы ветвей  $[L]$  или матрицы инциденций  $[S]$  ППГ.

Для представления информационной топологии ХТС применяют ИПГ (см. раздел 4.5). Параметры технологических потоков сырья и продуктов ХТС, а также технологические и конструкционные параметры каждого элемента ХТС представляют в виде специальных таблиц.

*Блок Б2* строится по модульному принципу, сущность которого изложена в разделах 3.3–3.5.

*Блок Б3* – это совокупность нескольких программ, которые организуют и контролируют выполнение всех операций моделирования, анализа и оптимизации ХТС; осуществляют декомпозицию ХТС на строго соподчиненные подсистемы; определяют оптимальную стратегию решения СУ. Для разработки программ этого блока используют алгоритмы оптимизации стратегии анализа ХТС на основе топологических моделей, подробно изложенные в гл. 6.

Помимо указанных операций блок управления обеспечивает возможность изменения технологической и информационной структуры ХТС; коррекцию; простоту и наглядность представления результатов моделирования ХТС. Блок управления и координации в некотором смысле моделирует работу руководителя-координатора, который направляет и организует исследования всей ХТС в целом, выдавая указания, а также получая и обрабатывая результаты от каждой группы инженеров, занимающихся исследованием отдельного элемента или подсистемы ХТС.

*Блок Б4* – блок определения параметров физико-химических свойств компонентов и смесей, часто содержит все физико-химические данные в виде большого массива исходной информации. Однако наиболее целесообразно, чтобы этот блок осуществлял автоматический расчет физико-химических свойств всех технологических потоков ХТС на основе минимального объема входной информации. Например, при заданных величинах молекулярной массы, температуры кипения при нормальных условиях и плотности блок должен определять энталпию и давление паров, а также оценивать параметры физических и термодинамических свойств химических соединений и смесей на основе теоретических и экспериментальных данных по различным регрессионным уравнениям.

Указанный блок также должен обеспечивать определение зависимых параметров свойств ТП (теплоемкость, плотность и вязкость) как функции независимых параметров состояний – массовый расход, покомпонентный состав, температура и давление.

Блок *Б5* программно реализует различные декомпозиционные численные методы решения многомерных информационно разреженных систем нелинейных и линейных уравнений, подробно изложенные в разделах 7.1 – 7.5.

Блок *Б6* программно реализует двухуровневые методы оптимизации СХТС, изложенные в разделах 7.7 и 7.8.

Блок *Б7* программно реализует методы и алгоритмы расчета оценок различных свойств ХТС (чувствительность, надежность, устойчивость и др.).

Блок *Б8* программно реализует вывод результатов расчетов.

Первые СПЦМ были разработаны в ряде индустриально развитых капиталистических государств в конце 1960-х годов ("PACER", "GEMCS", "SPEEDUP", "CHESS", "PROVES", "FLOWTRAN" и др.). В СССР с начала 1970-х годов наиболее широко используются СПЦМ, созданные в научно-исследовательских и проектных организациях: НИФХИ им. Карпова, Сибирском энергетическом институте Сибирского отделения АН СССР, ВНИПИНефти, ГИАПе, НИИУИФе им. Самойлова, НПО «Карбонат», а также в вузах: МХТИ им. Д. И. Менделеева, ЛТИ им. Ленсовета и Киевском политехническом институте. Известны СПЦМ, созданные в Венгрии (исследовательский институт вычислительной техники и автоматизации), Болгарии (центральная лаборатория автоматизации, БАН (Софийский ХТИ), Германии (высшая техническая школа им. К. Шорлеммера) и ЧСФР (Институт химического машиностроения г. Брно).

## 7.9. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ.

В.7-1. Дайте общую характеристику прямых и итерационных численных методов решения задач анализа ХТС.

В.7-2. В чем сущность операций модификации метода простой итерации для решения СНАУ и СЛАУ?

В.7-3. Назовите преимущества и недостатки метода простой итерации.

В.7-4. Что такое число обусловленности СЛАУ?

В.7-5. Какая взаимосвязь между числом обусловленности и погрешностью приближенного решения СЛАУ?

В.7-6. Какие основные трудности возникают при численном решении СНАУ?

В.7-7. Назовите основные преимущества квазиньютоновских методов численного решения СНАУ.

В.7-8. Нарисуйте общую блок-схему методики численного решения алгебраическо-дифференциальных СУ математического описания ХТС.

В.7-9. Назовите два основных этапа процедуры решения СНАУ с использованием метода Ньютона.

В.7-10. Сформулируйте основные этапы решения задач оптимизации ХТС

с использованием двухуровневых методов: метода цен и метода закрепления промежуточных переменных.

В.7-11. Назовите основные преимущества и недостатки двухуровневых методов оптимизации ХТС.

3.7-1. Составьте блок-схемы алгоритмов решения СНАУ по методу простой итерации и обобщенному методу доминирующих собственных значений.

3.7-2. Составьте блок-схемы алгоритмов решения СНАУ по методу Ньютона и по методу Брайдена.

3.7-3. Проверьте сходимость вычислений при решении уравнения:  $x - 10 = 0$  методом простой итерации с шагом  $h = 0,5$  и  $h = 4$ , задавшись начальным приближением  $x_0 = 0$ .

3.7-4. Запишите соотношения для определения элементов следующих СБКФ, разреженных матриц: трехдиагональной (ленточной) нижней и верхней треугольной, блочно-диагональной, блочно-диагональной с вертикальным окаймлением.

3.7-5. Составьте блок-схему алгоритма решения информационно разреженных СЛАУ с использованием метода Гаусса, в котором применяется трехсписочная упакованная форма хранения разреженной матрицы СЛАУ и арифметические операции с исходными НЭ не выполняются.

3.7-6. Составьте математическую формулировку задачи оптимизации одноконтурной ХТС, структурная схема которой показана на рис. 7.6, а с использованием двухуровневого метода закрепления промежуточных переменных.

## ОСНОВЫ ТЕОРИИ СИНТЕЗА ОПТИМАЛЬНЫХ ХТС

### Глава 8

## ПРИНЦИПЫ СИНТЕЗА ОПТИМАЛЬНЫХ ХТС

### 8.1 КЛАССИФИКАЦИЯ ИСХОДНЫХ ЗАДАЧ СИНТЕЗА ХТС

Каждая неформализуемая задача синтеза ХТС  $P$  имеет множество альтернативных семантических решений  $\{P\}$ . Семантическое, или смысловое решение  $P_i \in \{P\}$  неформализуемой задачи синтеза ХТС – это словесное описание (чертеж, или условное графическое изображение) технологической схемы ХТС, сущности физико-химических явлений каждого ХТП, режимов функционирования ХТС, конструкции аппаратов и машин химической технологии. Каждому семантическому решению по определенному условию можно поставить в соответствие некоторую ММ.

Поиск рациональных семантических решений неформализуемых задач синтеза ресурсосберегающих ХТС осуществляется в результате интеллектуальной творческой деятельности лица, принимающего решения (ЛПР). Для этого требуется, прежде всего, переработать огромное количество разнообразных знаний конкретной предметной области (ПО), и эта деятельность не связана с проведением вычислительных операций с данными.

Знания отображаются в какой-либо знаковой, или семиотической форме, например, в самом общем случае, на естественном языке (ЕЯ) или на некотором формализованном языке (ФЯ) данной ПО.

Знания, необходимые для выполнения ЛПР творческих интеллектуальных операций поиска семантических решений неформализуемых задач синтеза ХТС, в отличие от данных обладают следующими характерными свойствами: 1) смысловое истолкование или интерпретируемость сведений (понятий); 2) классифицируемость взаимосвязей между сведениями, отображающая наличие упорядоченных связей между отдельными сведениями; 3) ситуативность отношений между понятиями, отображающая наличие смысловых и целевых отношений, которые позволяют устанавливать совместимость или несовместимость тех или иных понятий между собой.

Выделяются два вида знаний о некоторой ПО: декларативные и процедурные. Декларативные знания представляются, как правило, на естественном языке и отображают устройство внешнего

мира, или некоторого ПО, но не содержат в явном виде описание каких-либо конкретных процедур, обеспечивающих поиск целесообразных решений в новой ситуации.

Процедурные знания – это сведения о совокупности конкретных процедур, этапов или шагов поиска целесообразных решений в новой ситуации, представленных либо на естественном языке, либо на некотором формализованном.

Для поиска решений каких-либо формализуемых задач с использованием процедурных знаний, программно реализованных в ЭВМ, требуется многообразная фактографическая информация в виде некоторых структур данных (машинные слова, векторы, массивы, файлы, списки, абстрактные типы данных).

Некоторые знания, необходимые для генерации смысловых решений исходной задачи синтеза (ИЗС), формулируются в виде эвристик, или эвристических правил. Эвристическое правило (ЭП), или эвристика – это либо некоторое утверждение, являющееся результатом обобщения существующих теоретических знаний в области химии, физики, химической технологии и кибернетики ХТП, либо некоторое интуитивное или эмпирическое предположение исследователя, которое может привести к рациональному семантическому решению задачи синтеза ХТС, что позволяет резко сократить перебор множества возможных альтернативных вариантов решений ИЗС.

Постановка любой ИЗС ХТС определяется множеством знаний и данных  $P$ , отображающим желаемые цели, параметры и свойства функционирования синтезируемой ХТС, а также некоторые физико-химические и технологические сведения, обеспечивающие возможность выполнения системой поставленной цели функционирования. Для каждой ИЗС  $P$  существует оптимальное решение  $\mathcal{P}^* \in \{P\}$ , где  $\{P\}$  – множество всех семантических решений. Решение  $\mathcal{P}^*$  представляет собой такую оптимальную технологическую схему ХТС, для которой величина КЭ функционирования  $\psi$  (1.5) или (1.6) экстремальна.

Различные задачи синтеза ХТС, которые возникают при проектировании ресурсосберегающих ХП, можно подразделить на два класса: задачи структурно-параметрического и структурного синтеза. Рассмотрим содержательные постановки некоторых ИЗС.

**I. Класс задач структурно-параметрического синтеза ХТС. ИЗС I-1.** В соответствии с выбранным КЭ производства  $\psi$  необходимо синтезировать оптимальную ХТС для выпуска требуемого продукта, если заданы: значения параметров входных  $\bar{X}$  и (или) выходных  $\bar{Y}$  потоков ХТС, желаемые значения характеристик некоторых свойств функционирования системы  $\bar{S}^*$ , различные физико-химические и технологические сведения, обеспечивающие выполнение создаваемой ХТС поставленных целей функционирования  $KN$ , в том числе, современный уровень инженерно-

аппаратурного оформления ХТП  $\bar{A}$ , предельная или граничная оценка КЭ  $\psi^*$ , параметры окружающей среды  $\bar{V}$ .

Требуется определить:  $L$  – химический способ производства продукта,  $\{g\}$  – множество разнообразных типов ХТП,  $\{\mathcal{K}\}$  – множество разнообразных типоаппаратов, технологическую топологию системы  $G$ , покомпонентный состав и параметры промежуточных потоков системы  $\bar{Z}$ , технологические  $\bar{D}$  и конструкционные  $\bar{K}$  параметры аппаратов, при которых для синтезированной системы обеспечивается оптимум КЭ  $\psi^* = \text{opt } \psi$ .

ИЗС I-2. Заданы: химический способ производства, или маршрут химического синтеза молекул целевого продукта из известных исходных веществ в создаваемой ХТС.

Необходимо: выбрать типы ХТП  $\{g\}$ ; установить совокупность ХТП; которые могут протекать в элементах различного типа; выбрать структуру  $G$ , покомпонентный состав и параметры ТП между элементами  $Z$ ; определить типо-конструкции элементов  $\mathcal{K}$ ; параметры элементов ХТС  $D$  и  $K$ , которые обеспечивают оптимальное значение некоторого КЭ  $\psi^*$  с учетом ряда исходных ограничений: параметров входных  $\bar{X}$  и (или) выходных  $\bar{Y}$  технологических потоков; различные физико-химические и технологические знания данной ПО  $KN$ ; желаемые значения некоторых функциональных характеристик ХТС  $S^*$ ; современный уровень инженерно-аппаратурного оформления ХТП  $\bar{A}$ , некоторое предельное, или граничное оптимальное значение выбранного КЭ  $\psi^*$  и параметры окружающей среды  $\bar{V}$ .

Условная форма записи постановки ИЗС I-2 имеет следующий вид.

Дано:  $P = (L; \bar{Y}; \bar{X}; KN; \bar{S}^*; \bar{A}; \bar{V}; \psi^*)$ . Требуется определить:  $g, G, \mathcal{K}, \bar{K}, D, Z$ , при которых  $\psi^* = \text{opt } \psi$ .

ИЗС I-3. Заданы: маршрут химического синтеза молекул целевого продукта  $L$ ; множество разнообразных типов ХТП  $\{g\}$ ; множество типо-конструкций элементов ХТС  $\{\mathcal{K}\}$ , которые могут обеспечить выполнение целей функционирования синтезируемой ХТС. Необходимо: выбрать типы ХТП; типо-конструкции элементов системы; определить параметры элементов и структуру технологических связей ХТС, при которой КЭ системы будет иметь оптимальное значение с учетом ряда исходных ограничений. В условной форме постановка ИЗС I-3 имеет следующий вид.

Дано:  $P(L, \{g\}, \{\mathcal{K}\}, \bar{X}, \bar{Y}, \bar{S}^*, \bar{V}, \bar{A}, \psi)$ , необходимо определить:  $g, G, \mathcal{K}, \bar{K}, \bar{D}, Z$ , при которых  $\psi^* = \text{opt } \psi$ . Очевидно, что ИЗС I-1 – ИЗС I-3 представляют собой задачи синтеза оптимальных неоднородных ХТС.

ИЗС I-4. Заданы: типы ХТП и типо-конструкции элементов ХТС, совокупность которых может обеспечить выполнение требуемых целей функционирования ХТС, необходимо определить технологическую топологию, параметры элементов и тех-

нологических потоков, которые позволяют получить оптимум КЭ синтезированной системы с учетом исходных ограничений. В условной форме постановка ИЗС I-4 имеет вид.

Дано:  $P = (g, \mathcal{X}, \bar{X}, \bar{Y}, \bar{S}^*, \bar{V}, \bar{A}, \psi_n)$ . Необходимо определить:  $G, K, D, Z$ , при которых  $\psi^* = \text{opt } \psi$ .

ИЗС I-4 представляет собой задачу синтеза оптимальных однородных ХТС, к которым относятся теплообменная система (ТС) и система разделения (СР) (см. раздел 1.3).

ИЗС I-5. Задано: множество альтернативных вариантов технологической топологии ХТС, обеспечивающих выполнение требуемой цели функционирования системы. Необходимо определить: технологическую топологию, параметры элементов и технологических потоков системы, которые позволяют получить оптимальное значение КЭ синтезированной ХТС с учетом исходных ограничений. Запишем ИЗС I-5 в условной форме.

Дано:  $P = (G_1, G_2, \dots, G_n, \bar{X}, \bar{Y}, \bar{V}, \bar{A}, \psi^*)$ . Необходимо определить:  $G, K, D, Z$ , при которых  $\psi^* = \text{opt } \psi$ . Задачи I-5 представляют собой ИЗС на заданном множестве альтернативных вариантов технологической топологии ХТС  $G_1, G_2, \dots, G_n$ .

ИЗС I-6. Заданы: типы ХТП и типо-конструкции элементов ХТС, совокупность которых может обеспечить выполнение требуемых целей функционирования системы в условиях объективной неопределенности априорной информации о физико-химических константах ХТП (константы скоростей химических реакций; константы фазового равновесия – коэффициенты теплопередачи и массопередачи и др.), о параметрах свойств технологических потоков и при стохастических внешних воздействиях на ХТС. Необходимо определить: технологическую топологию ХТС и величину границ допусков (или коэффициентов запаса) для параметров элементов, которые обеспечивают на некотором интервале времени желаемый уровень проектно-расчетной надежности ХТС (заданная величина интервальных оценок параметров выходных потоков системы) при экстремуме КЭ ее функционирования с учетом исходных ограничений.

**II. Класс задач структурного синтеза ХТС. ИЗС II-1.** Заданы: технологическая топология ХТС, параметры элементов и технологических потоков, величины характеристик надежности отдельных элементов, а также ограничения на величину характеристик надежности системы (вероятность безотказной работы ХТС на некотором интервале времени). Необходимо: осуществить оптимальную коррекцию технологической топологии, вводя в структуру системы резервные элементы, обеспечивающие такую величину вероятности безотказной работы ХТС на некотором интервале времени, которая позволяет получить оптимум КЭ функционирования ХТС с учетом исходных ограничений.

ИЗС II-2. Заданы: технологическая топология, параметры элементов и технологических потоков, величины характеристик

надежности отдельных элементов, а также ограничения по величине дополнительных капитальных затрат на резервные элементы для повышения характеристик надежности ХТС. Необходимо: осуществить оптимальную коррекцию технологической топологии с использованием поэлементного резервирования, обеспечивающего такую величину вероятности безотказной работы ХТС на некотором интервале времени, которая позволяет получить экстремум КЭ функционирования системы с учетом исходных ограничений.

ИЗС II-1 и ИЗС II-2 называют соответственно *прямой* и *обратной* задачей структурного синтеза *оптимально надежных ХТС*.

ИЗС II-3. Заданы: технологическая топология ХТС, параметры элементов и технологических потоков, а также ограничения на величину характеристик чувствительности системы, необходимо осуществить оптимальную коррекцию структуры технологических связей между элементами, чтобы обеспечить оптимум КЭ функционирования системы с учетом исходных ограничений.

Среди разнообразных ИЗС ресурсосберегающих ХТС наибольшей сложностью отличаются задачи структурно-параметрического синтеза.

## 8.2. КРАТКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА СПОСОБОВ И ПРИЕМОВ РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЯ В ХТС

Разработка научно обоснованных высокоэффективных семантических решений ИЗС ресурсосберегающих ХТС методически базируется на применении следующих основных физико-химических и технологических способов ресурсосбережения в химических отраслях промышленности: способа наилучшего использования движущей силы (ДС) химико-технологических процессов (ХТП), способа наиболее полной переработки сырья, способа рационального использования топливно-энергетических ресурсов, способа наилучшего функционально-структурного использования аппаратов и машин, способа замкнутого водоснабжения, способа обеспечения и повышения надежности производства, способа рациональной пространственной компоновки производства.

Для осуществления любого ХТП переработки сырья необходимо наличие ДС процесса, представляющей собой первоисточник всех химических и физико-химических преобразований вещества и энергии. Величина ДС влияет на скорость ХТП. В общем случае формула для расчета скорости любого ХТП имеет следующий вид:

$$u = k\epsilon/R, \quad (8.1)$$

где  $u$  – скорость ХТП;  $k$  – константа скорости;  $\varepsilon$  – движущая сила;  $R$  – сопротивление процесса.

Скорость ХТП определяет производительность аппаратов, их число в технологической схеме ХТС. Интенсивность работы аппарата ХТС равна удельной производительности аппарата на единицу объема или площади его сечения. В технологические схемы ресурсосберегающих ХТС (РХТС) должны входить высоконаклонсивные ХТП и аппараты химической технологии. Интенсификация работы аппаратов достигается в результате повышения эффективности ХТП и улучшения их инженерно-аппаратурного оформления, т. е. улучшения конструкций аппаратов.

Способ наилучшего использования ДС химико-технологических процессов является основополагающим способом ресурсосбережения, так как только этот способ принципиально позволяет значительно повышать степень переработки материальных ресурсов, резко снижать потери сырья, топлива и энергии, а также существенно сокращать затраты конструкционных материалов при производстве химической продукции. Все другие способы ресурсосбережения в химической индустрии, в частности, способы наиболее полной переработки сырья и рационального использования ТЭР, направлены на всестороннее обеспечение и реализацию основополагающего способа – способа наилучшего использования движущей силы ХТС.

Для практической реализации различных способов ресурсосбережения в химической индустрии применяют разнообразные режимно-параметрические, технологические, аппаратурно-конструкционные и организационно-технические приемы и операции.

Кратко рассмотрим общую характеристику основных приемов, операций и средств, направленных на обеспечение ресурсосбережения в химической индустрии. Важнейшими *режимно-параметрическими приемами и операциями ресурсосбережения* являются: оптимизация значений концентраций реагирующих веществ; оптимизация значений параметров технологических режимов ХТП – температуры и давления; смещение состояния равновесия обратимых ХТП в желаемом направлении; изменение механизма химических превращений; использование одного из реагентов в избытке; применение высокоактивных и селективных катализаторов; изменение скорости движения фаз перерабатываемых веществ; увеличение поверхности соприкосновения перерабатываемых веществ; изменение направления движения потоков взаимодействующих веществ; ввод дополнительных веществ – инициаторов, промежуточных теплоносителей, поверхностно-активных веществ, растворителей, разделяющих агентов; изменение числа фаз перерабатываемых веществ (ввод инертных газов или твердых тел, изменение агрегатного состояния одного из перерабатываемых веществ путем конденсации или испарения, кристаллизации одного из продуктов реакции).

Основными технологическими приемами и операциями ресурсосбережения являются совмещение различных процессов химической технологии в одном аппарате (различных химических процессов, химических и массообменных, химических и теплообменных процессов); дискретно-периодическая подача потоков перерабатываемых веществ в аппарат (периодическая подача потоков веществ, наложение внешних пульсаций на фазы и потоки веществ, использование турбулентных пульсаций); создание внешних энергетических воздействий на ХТП (электрических и магнитных полей, радиационного и лазерного излучений); применение внешних перемешивающих устройств; регенерация и рекуперация вторичных материальных ресурсов; создание рациональных технологических связей между аппаратами ХТС (байпасные, параллельные и обратные технологические потоки вещества и энергии); исключение промежуточных технологических стадий и операций; согласование режимов функционирования ХТП.

К важнейшим аппаратурно-конструкционным приемам и операциям ресурсосбережения относятся: создание рациональных конструкций аппаратов (выбор геометрической формы узлов и деталей аппарата, в частности, единиц массопереноса; выбор материала конструкций); определение оптимальных размеров аппарата; изменение схем движения перерабатываемых веществ; создание многократного воздействия на фазы перерабатываемых веществ (продольное и поперечное секционирование, распределение фаз по высоте аппарата, многократная конверсия фаз и др.); использование энергии контактирующих фаз (турбулизация и соударение потоков, закручивание фаз, транспортирование одной фазы другой фазой, взаимное эжектирование и др.); совмещение отдельных узлов и аппаратов (комбинирование однотипных аппаратов и узлов, агрегирование функций аппаратов и узлов); модульное конструирование многофункциональных аппаратов.

Основными организационно-техническими приемами ресурсосбережения в химической индустрии являются: обогащение и выбор наилучших видов природного сырья; комплексная переработка минерального сырья; комбинирование ХТП; комбинированное ХТС.

Необходимо отметить, что большинство режимно-параметрических, технологических и аппаратурно-конструкционных приемов ресурсосбережения диалектически взаимосвязаны. Использование одного из режимно-параметрических или технологических приемов, как правило, всегда связано с изменениями инженерно-аппаратурного оформления ХТП, которые объективно требуют использования какого-либо аппаратурно-конструкционного приема или средства ресурсосбережения. Применение одного и того же режимно-параметрического, технологического и аппаратурно-конструкционного приема может обеспечивать

одновременную реализацию различных способов ресурсосбережения для одного ХТП или для ХТС в целом.

В связи с этим для получения научно обоснованных семантических решений при синтезе РХТС на основе рационального использования разнообразных способов, приемов и операций ресурсосбережения в химической индустрии необходимо широко использовать принципы теории синтеза ХТС, методы математического моделирования и оптимизации ХТП, теорию анализа и оптимизации ХТС.

Кратко изложим сущность физико-химических и технологических способов ресурсосбережения в ХТС. Способ увеличения ДС химических процессов реализуется при помощи следующих режимно-параметрических приемов и операций: 1) увеличение концентрации взаимодействующих компонентов в сырье; 2) увеличение давления; 3) отвод продуктов реакции из реакционного объема; 4) смещение равновесия при изменении температуры и давления.

Способ наиболее полной переработки сырья в РХТС практически реализуют с использованием следующих режимно-параметрических, технологических и аппаратурно-конструкционных приемов: избыток реагента по отношению к теоретически необходимому количеству; организация противотока перерабатываемых веществ; смещение равновесия при обратимых реакциях; воздействие на нежелательные побочные реакции; стабилизация наиболее рационального (оптимального) состояния проведения ХТП; организация последовательно-обводных, или байпасных и обратных, или рециклических технологических потоков в ХТС; регенерация вспомогательных исходных веществ; рекуперация побочных продуктов и отходов; создание совмещенных ХТП; введение дополнительного вещества; многократное воздействие на фазы перерабатываемых веществ.

Основными режимно-параметрическими приемами и операциями, реализующими способ наилучшего использования ТЭР в РХТС, являются: выбор оптимального вида сырья, применение высокоэффективных катализаторов, выбор направления относительного движения теплообменяющихся потоков; оптимизация температурных режимов для проведения ХТП и др.

Для реализации способа наилучшего использования ТЭР наиболее широко применяют следующие технологические приемы и операции: регенерацию и рекуперацию теплоты; многократное использование теплоты; совмещение тепловых, химических и массообменных процессов; применение рациональных ХТП выделения готовых продуктов; наиболее полную утилизацию вторичных энергоресурсов (ВЭР); использование атомной энергии; использование нетрадиционных источников энергии.

Аппаратурно-конструкционными приемами рационального использования ТЭР в РХТС являются: разработка высокоеффек-

тивного инженерно-аппаратурного оформления энергосберегающих ХТП; сокращение прямых потерь ТЭР и повышение надежности оборудования, снижение затрат энергии на процессы измельчения, снижение затрат энергии на транспортировку технологических потоков и др.

К основным организационно-технологическим мероприятиям, обеспечивающим наилучшее использование ТЭР, относятся: комплексное использование сырья и ТЭР; тепло-энергетическое комбинирование ХТП, ХТС и производств; оптимальная организация эксплуатации энергетического оборудования и др.

Способ наилучшего функционально-структурного использования оборудования ресурсосберегающего химического производства (РХП) включает следующие основные приемы и операции, часть из которых также используется для реализации других способов ресурсосбережения – наилучшего использования движущей силы ХТП, наиболее полной переработки сырья и др.

Основные режимно-параметрические и аппаратурно-конструкционные приемы наилучшего использования оборудования: уменьшение сопротивлений массо- и теплопереносу, которые лимитируют процессы химического превращения; уменьшение гидравлического сопротивления аппаратов и машин; снижение кинетических сопротивлений для химических превращений; комбинирование однотипных аппаратов и узлов; агрегатирование функций аппаратов и узлов; создание оптимального инженерно-аппаратурного оформления ХТП и др.

К важнейшим технологическим приемам относятся: создание оптимальных технологических связей между оборудованием (байпасные и обратные технологические потоки); исключение нерациональных промежуточных технологических стадий, или операций производства; дискретно периодическая подача вещества в аппарат и др. Основные организационно-технические приемы наилучшего функционально-структурного использования оборудования в РХП: выбор режима функционирования ХТП (непрерывный, периодический, полуунпрерывный режим); создание совмещенных гибких ХТС для выпуска многоассортиментной продукции с периодическими и полуунпрерывными ХТП; разработка распределенных иерархических АСУТП; создание комбинированных ХТС; комплексная переработка сырья и ТЭР; утилизация вторичных материалов и вторичных энергоресурсов и др.

Очевидно, что среди указанных приемов наилучшего функционально-структурного использования оборудования многие, например, создание байпасных и обратных технологических потоков, комплексная переработка сырья и ТЭР, комбинирование ХТС, совмещение ХТП, утилизация вторичных материалов и ВЭР, создание иерархических АСУТП обеспечивают как наилучшее использование ТЭР, так и наиболее полную переработку

сырья, т. е. позволяют комплексно уменьшить материалоемкость продукции ХТС.

Выбор оптимальной компоновки оборудования позволяет снизить удельные расходы ТЭР и конструкционных материалов производства. Одним из важных путей ресурсосбережения в ХТС является стабилизация параметров оптимальных технологических режимов производства, которую обеспечивают иерархические распределенные АСУТП и АСУП химической промышленности.

Пример 8.1. Необходимо составить набор эвристических правил (ЭП), которые позволяют осуществить генерацию рациональных технологических схем реакторного узла ХТС, обеспечивающего заданное значение выхода целевого продукта. Реакторный узел может состоять из реакторов идеального смешения (РИС) или реакторов идеального вытеснения (РИВ), в которых протекает экзотермическая химическая реакция с невысокой степенью превращения.

*Решение.* Для генерации альтернативных вариантов рациональных технологических схем реакторного узла можно использовать следующий набор ЭП:

1) если реакторный узел представляет собой последовательность РИС, в которых протекает реакция с невысокой степенью превращения, то необходимо увеличить число последовательно соединенных РИС;

2) если в реакторный узел входит РИВ, в котором протекает реакция с невысокой степенью превращения, то для повышения степени превращения необходимо увеличить его длину;

3) увеличения степени превращения в реакторном узле можно добиться, если ввести обратный ТП, что особенно важно, когда исходное сырье дорого и сброс непреагировавших продуктов невыгоден;

4) тепло выходного потока реактора, в котором протекает экзотермическая реакция, можно использовать либо для подогрева исходной смеси, либо для получения пара;

5) можно применить ТП исходных реагентов для охлаждения промежуточных ТП в реакторе с адиабатическими слоями, в которых протекают экзотермические реакции.

Охлаждение ТП в многослойном адиабатическом реакторе можно проводить, либо рекуперируя тепло, либо смешивая исходный и промежуточный потоки.

Применение различных ЭП из этого набора позволяет генерировать альтернативные варианты технологических схем реакторного узла, которые различаются величинами капитальных и эксплуатационных затрат, а также обеспечивают различный выход целевого продукта.

Пример 8.2. Необходимо синтезировать альтернативные варианты операторных схем разделения порошковой смеси пяти пластмасс (поливинилхлорид ПВХ, полистирол ПС, полиэтилен высокой плотности ПЭВП, полиэтилен низкой плотности ПЭНП, полипропилен ПП), имеющих различный удельный вес (табл. 8.1). Для разделения смеси пластмасс использовать процесс осаждения порошка в жидкости с таким удельным весом, при котором легкие твердые частицы всплывают, а другие тяжелые осаждаются. Для получения разделяющего

Таблица 8.1. Физические характеристики смеси пластмасс

Пластмасса	Количество, кг	Удельный вес, γ
Поливинилхлорид (ПВХ)	200	1,313
Полистирол (ПС)	100	1,055
Полиэтилен высокой плотности (ПЭВП)	250	0,958
Полиэтилен низкой плотности (ПЭНП)	350	0,916
Полипропилен (ПП)	100	0,901

агента – тяжелой жидкости с удельным весом  $\gamma_{\text{ж}} > 1$  можно смешать воду с солью, а для получения легкой жидкости с  $\gamma_{\text{ж}} < 1$  можно смешать воду со спиртом.

**Решение.** При разделении сложных смесей одни ее компоненты отделяются легко, другие – трудно. В первом случае процесс разделения можно осуществить быстро и с минимальными затратами, во втором случае для разделения потребуются специальное оборудование и большие эксплуатационные расходы. Показателем сложности процессов разделения является степень различия свойств разделяемых компонентов: чем большие различие, тем проще осуществить процесс разделения.

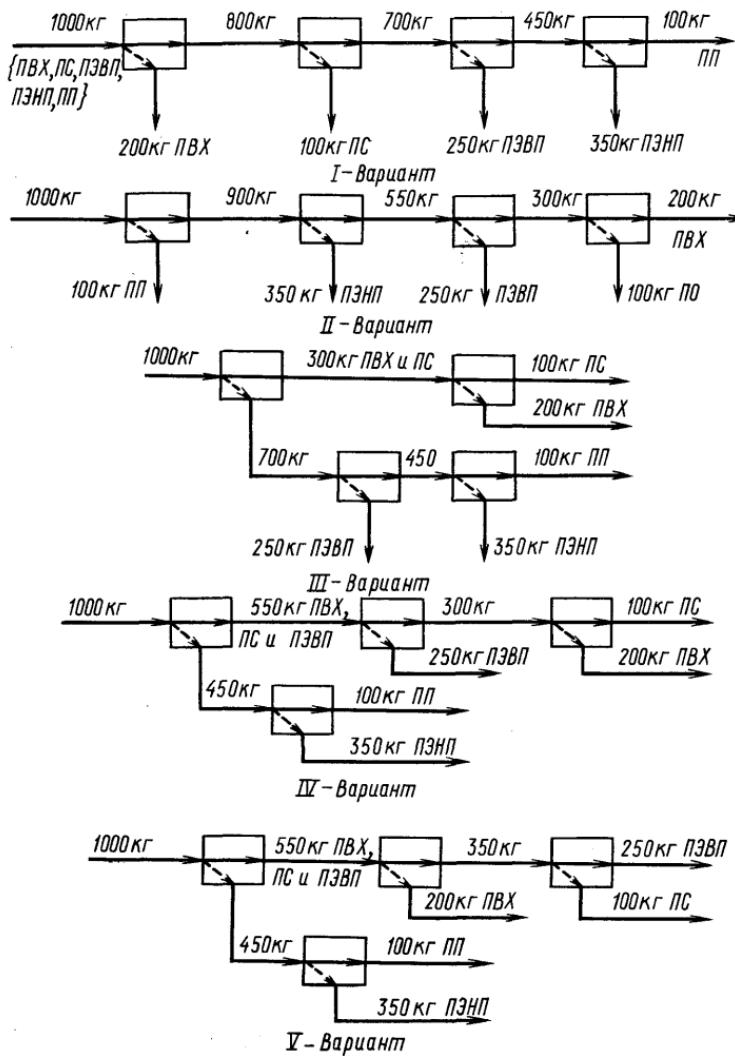


Рис. 8.1. Пять вариантов операторных схем разделения порошковой смеси пяти пластмасс: ПВХ, ПС, ПЭВП, ПЭНП и ПП

Два основных ЭП для процессов разделения: сначала осуществляется простой процесс разделения, т. е. отделяются компоненты, легко поддающиеся разделению, а затем – сложный процесс разделения: желательно, чтобы для каждого последующего процесса разделения осталось как можно меньше компонентов. Самый сложный процесс – это разделение смеси ПП и ПЭНП, поскольку разность их удельных весов составляет  $\gamma_{\text{пнн}} - \gamma_{\text{пп}} = 0,015$ . Удельные веса двух полизитиленовых фракций также незначительно отличаются один от другого. Что касается разделения других компонентов, то, по-видимому, оно не является сложным. На рис. 8.1 представлены пять вариантов операторных схем разделения смеси пяти пластмасс. Предпочтение отдается варианту I – варианту простого разделения.

Однако существует еще одна возможность простого разделения (вариант III): разделить смесь пластмасс в точке перечня свойств между удельными весами 0,958 и 1,055, т. е. в точке разделения между ПС и ПЭВН.

Руководствуясь практическими соображениями, сначала разделяют компоненты с удельным весом 0,958 и 1,055, т. е. вариант III, и используют для этого дешевую жидкость – воду. Затем определяют ПС и ПВХ от смеси. Далее можно приступить к более трудному процессу – разделению ПЭНП и ПП.

Стоимость оборудования для процессов разделения примерно пропорциональна общей нагрузке этого оборудования, т. е. количеству веществ, которое оно способно обработать. При прочих равных условиях можно снизить капитальные и эксплуатационные расходы, если проводить процесс разделения так, чтобы для каждого последующего этапа оставалось как можно меньше веществ, подлежащих разделению. Однако при разделении смеси пластмасс нецелесообразно руководствоваться этим ЭП, так как в противном случае первым следовало бы удалять из смеси ПЭНП. Из пяти вариантов операторных схем – варианты IV и V, по которым смесь пластмасс первоначально разделяется на равные части, требуют минимальной обработки (по величине общей нагрузки на разделители). По варианту IV смесь сначала разделяется на две почти равные части и затем при удалении ПЭВП еще раз делится на две почти равные части. В отношении обработки вещества вариант IV был бы предпочтительнее остальных, но только «при прочих равных условиях». Следовательно, в данном случае целесообразнее использовать воду в качестве разделяющего агента, а не использовать ЭП «дихотомии» (деление пополам).

### 8.3 КЛАССИФИКАЦИЯ И ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ПРИНЦИПОВ СИНТЕЗА ХТС

Поиск семантических решений практических задач синтеза ХТС  $\mathcal{P}^*$ , связанный с генерацией и полным перебором огромного числа альтернативных вариантов решений, является даже с применением ЭВМ весьма трудоемким, а в ряде случаев и принципиально неосуществимым. Поэтому возникла необходимость в разработке принципов синтеза оптимальных ХТС, которые позволяют создавать для ЭВМ наиболее экономичные и быстро действующие специальные методы автоматизированного поиска оптимальных решений различных ИЗС и сокращать перебор многомерного множества возможных решений  $\{P\}$ .

Принципы синтеза оптимальных ХТС комплексно отражают основные технологические, эвристические и математические положения теории поиска оптимальных решений при разработке высоконадежных технологических схем ХТС с оптимальными расходами материальных ресурсов. Предложены следующие принципы синтеза оптимальных ресурсосберегающих ХТС:

декомпозиционно-поисковый; 2) эвристическо-декомпозиционный; 3) интегрально-гипотетический и 4) эволюционный.

Сущность декомпозиционно-поискового принципа (ДП-принципа) состоит в том, что поиск оптимальной технологической схемы  $\mathcal{P}^* \in \{P\}$  осуществляют, выполняя декомпозицию многомерной исходной задачи синтеза ХТС на совокупность более простых задач, а также поэлементно-декомпозиционную генерацию перебора только лишь перспективных, или рациональных вариантов семантического решения ИЗС.

Сущность эвристическо-декомпозиционного принципа (ЭД-принципа) синтеза ХТС состоит в том, что поэлементный поиск оптимальной технологической схемы ХТС проводится путем декомпозиционной генерации и упорядоченного перебора множества технологических схем, которые получены при заданном числе попыток синтеза системы на основе использования определенного набора ЭП.

Сущность интегрально-гипотетического принципа (ИГ-принципа) состоит в создании оптимальной технологической схемы ХТС  $\mathcal{P}^* \in \{P\}$  в результате вычисления этой схемы из некоторой гипотетической обобщенной технологической структуры (ГОТС), которая образуется объединением различных заданных альтернативных вариантов технологических схем данной ХТС.

Сущность эволюционного принципа (ЭВ-принципа) состоит в создании оптимальной технологической схемы ХТС на основе последовательной эволюционной модификации отдельных элементов и подсистем некоторой исходной технологической схемы данной ХТС.

ДП- и ЭД-принципы, которые реализуют поэлементно-декомпозиционную генерацию технологических схем ХТС, целесообразно использовать для разработки методов автоматизированного решения задач структурно-параметрического синтеза: ИЗС I-1, ИЗС I-2, ИЗС I-4 и ИЗС I-6. ИГ-принцип рекомендуется применять для разработки методов автоматизированного решения задач структурно-параметрического синтеза: ИЗС I-4 и ИЗС I-5. Методы автоматизированного решения ИЗС I-3, а также задач структурного синтеза ХТС могут быть успешно разработаны на основе использования ЭВ- и ЭД-принципов синтеза ХТС.

Необходимо подчеркнуть, что наиболее эффективные методы автоматизированного решения различных классов ИЗС могут быть разработаны на основе комплексного использования нескольких принципов синтеза ХТС, а также на основе использования различных физико-химических и технологических способов, приемов и операций ресурсосбережения в ХТС, изложенных в разделе 8.2.

Пример 8.3. Необходимо синтезировать операторную схему ХТС производства этилацетата из этанола, т. е. выбрать типы технологических операторов, определить структуру и покомпонентный состав ТП системы. Этилацетат –

один из наиболее распространенных растворителей – получают по двухстадийной реакции. В первой реакции  $R_1$  этанол  $C_2H_5OH$  частично окисляется до уксусной кислоты  $-CH_3COOH$  и воды. Во второй реакции этерификации  $R_2$  избыток этанола реагирует с уксусной кислотой с образованием этилацетата  $CH_3COOC_2H_5$  и воды. Заданы следующие условия проведения реакций. Реакция  $R_1$ :  $C_2H_5OH + O_2 \rightarrow CH_3COOH + H_2O$  протекает при высоком давлении в газовой фазе в присутствии катализатора; необходимо наличие по крайней мере 50% азота как разбавителя; 20%-ный избыток кислорода против стехиометрии полного окисления этанола; этилацетат должен отсутствовать; наличие воды в исходном реагенте допускается.

Реакция  $R_2$ :  $C_2H_5OH + CH_3COOH \rightleftharpoons CH_3COOC_2H_5 + H_2O$  протекает в растворе при нормальных условиях со степенью превращения 60%; наличие воды и азота допустимы; кислород нежелателен.

Исходное сырье для ХТС: 70%-ный (мольный) водный раствор спирта, воздух [20% (мол.)  $O_2$  и 80% (мол.)  $N_2$ ].

Требуемые продукты: основной продукт – 1000 мол/ч чистого этилацетата. Этanol и уксусная кислота должны полностью перерабатываться в ХТС.

**Решение.** Только реакция  $R_2$  является источником этилацетата, поэтому именно она должна обеспечить получение 1000 мол/ч этилацетата. Так как степень превращения составляет только 60%, этанол и уксусную кислоту для проведения  $R_2$  необходимо иметь в избытке, т. е. с учетом стехиометрии реакции 1667 мол/ч этанола и уксусной кислоты (1000/0,60). По реакции  $R_2$  получится 1000 мол/ч побочного продукта – воды. Выходной поток из реактора  $R_1$  будет содержать смесь компонентов: 1000 мол/ч этилацетата, 1000 мол/ч воды и по 667 мол/ч этанола и уксусной кислоты.

Только реакция  $R_1$  является источником для получения 1667 мол/ч уксусной кислоты для осуществления реакции  $R_2$ ; однако после проведения реакции  $R_2$  остается 667 мол/ч непрореагировавшей уксусной кислоты. На каждые  $x$  мол/ч уксусной кислоты, получаемой по реакции  $R_1$  из  $x$  мол/ч этанола, необходимо

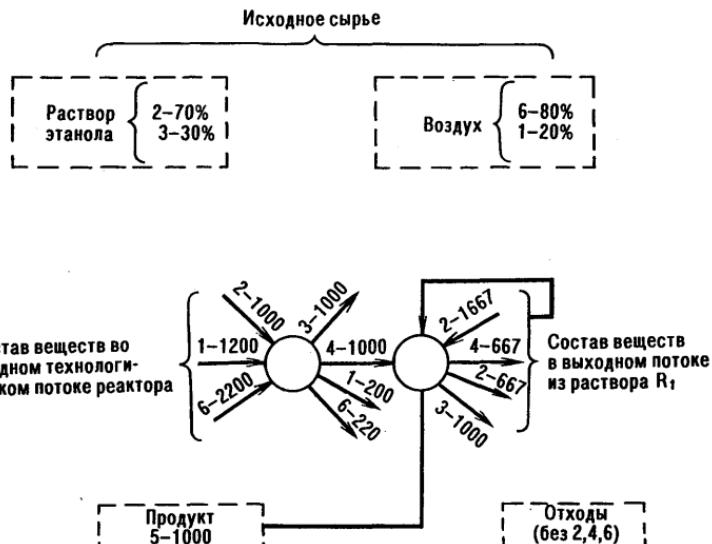


Рис. 8.2. Фрагмент обобщенной структуры и покомпонентного состава основных технологических потоков ХТС производства этилацетата:

1 – кислород; 2 – этанол; 3 – вода; 4 – уксусная кислота; 5 – продукт; 6 – азот, принято условное обозначение (1–1200–1200 моль/час кислорода и т. д.)

наличие во входном ТП реактора  $R_1$  кислорода в количестве  $1,20x$  мол/ч для обеспечения 20%-го избытка кислорода и, и по крайней мере,  $2,20x$  мол/ч азота как разбавителя входного потока питания.

В выходном потоке реактора  $R_1$  будет содержаться  $x$  мол/ч кислоты,  $x$  мол/ч воды, а также вода, поступающая в реактор  $R_1$  с сырьем, кроме того,  $0,20x$  мол/ч непрореагированного кислорода и  $2,20x$  мол/ч азота. Более того, можно определить, что величина  $x$  не меньше 1000 мол/ч (если вся непрореагированная по реакции  $R_2$  кислота возвращается в реактор  $R_1$ ) и не больше 1667 мол/ч (если кислота не возвращается в реактор). Однако если нельзя разложить избыточную уксусную кислоту (например, нейтрализацией, восстановлением или выжиганием), то вся кислота должна быть направлена в рецикл.

Рецикл может быть прямой – в реактор  $R_2$ , или непрямой – через реактор  $R_1$ . Поскольку уксусная кислота должна быть полностью переработана в ХТС, необходимо, чтобы все количество  $x = 1000$  мол/ч кислоты, полученной по реакции  $R_1$ , было превращено в этилацетат по реакции  $R_2$ .

На рис. 8.2. показан фрагмент обобщенной структуры и покомпонентный состав основных ТП синтезируемой ХТС. Необходимо определить полную структуру и покомпонентный состав всех ТП синтезируемой ХТС, которые будут соответствовать минимальным экономическим затратам.

Необходимо получить 1000 мол/ч этанола для реакции  $R_1$ , но имеется два источника этанола: исходное сырье – водный раствор этанола (70%-ный) и непрореагировавший этанол в реакции  $R_2$ . Рассмотрим выбор основного источника этанола. Вода является допустимой примесью для реакции  $R_1$ , но присутствие этилацетата в реакции  $R_1$  нежелательно. Если использовать рециркуляционный этанол из реактора  $R_2$ , то его необходимо тщательно очистить от этилацетата, а если направить рециркулят в реактор  $R_2$ , то примесь этилацетата не будет иметь значения. Следовательно, в качестве источника этанола для реакции  $R_1$  надо выбрать только его водный раствор. Рассмотрим далее вопрос об удалении воды из сырья перед реакцией  $R_1$ . В любом случае по реакции  $R_1$  получается вода, поэтому возможно проще подавать раствор сразу в реактор  $R_1$ . В этом случае 1000 мол/ч этанола и 430 мол/ч воды будут поступать в реактор  $R_1$ .

Имеется два источника кислорода для реактора  $R_1$ , который потребляет 1200 мол/ч  $O_2$ . Неограниченным источником кислорода является воздух; 200 мол/ч кислорода выходит из реактора  $R_1$ .

Таким образом, из воздуха нужно получить, по крайней мере, 1000 мол/ч кислорода. Вероятно, проще всего получить 1200 мол/ч  $O_2$  непосредственно из воздуха. Рассмотрим вопрос о достаточном количестве разбавителя – азота.

1200 мол/ч кислорода в воздухе соответствуют 4800 мол/ч азота, тогда как минимальная потребность в азоте 2200 мол/ч, что является допустимым при проектировании реакторов. Следовательно, в реактор  $R_1$  будет подано 1200 мол/ч кислорода и 4800 мол/ч азота.

В соответствии с материальным балансом синтезируемой ХТС следует, что из реактора  $R_1$  выходит 1000 мол/ч уксусной кислоты, 200 мол/ч кислорода, 4800 мол/ч азота, 1430 мол/ч воды. В выходном потоке реактора  $R_1$  уксусная кислота и вода – жидкости при нормальных условиях, кислород и азот – газы. Разделение двух фаз весьма простое. Уксусная кислота необходима для реакции  $R_2$ , кислород же нежелателен; следовательно они должны быть разделены. Таким образом, на выходе из реактора  $R_1$  должен стоять технологический оператор разделения. А как поступить со смесью вода – уксусная кислота? Так как вода образуется по реакции  $R_2$ , которая протекает в растворе, проще оставить смесь неразделенной.

Следовательно, из реактора  $R_1$  в реактор  $R_2$  будет поступать 1000 мол/ч уксусной кислоты и 1430 мол/ч воды; 200 мол/ч кислорода и 4800 мол/ч азота являются отходами ХТС и поэтому разделять их не нужно. Выберем источник для 1667 мол/ч этанола и избыточных 667 мол/ч уксусной кислоты для питания реактора. 667 мол/ч избыточного этанола и уксусной кислоты будут рециркулировать из раствора  $R_2$  и смешиваться с сырьем, содержащим 1000 мол/ч этанола. Вместе с сырьем (раствором этанола) необходимо также вводить 430 мол/ч воды.

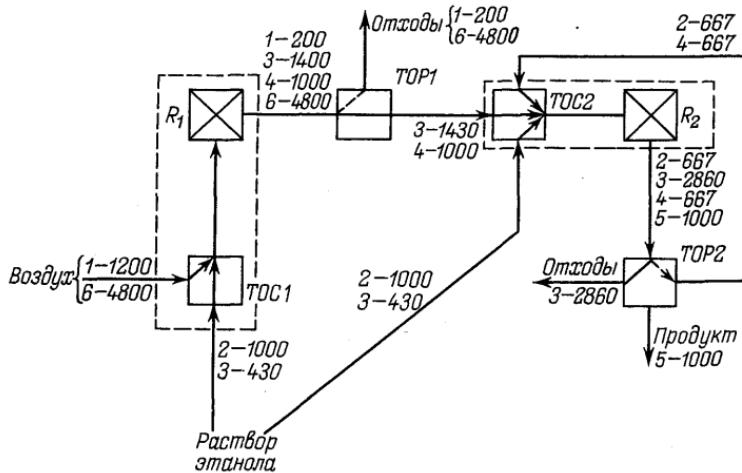


Рис. 8.3. Вариант операторной схемы XTC производства этилацетата:

*R*-оператор химического превращения, *TOP* (*ТОС*)—технологический оператор разделения (смешения), обозначения потоков (см. на рис. 8.2)

Таким образом, в выходном потоке реактора  $R_2$  будет содержаться 1000 мол/ч этилацетата, 667 мол/ч уксусной кислоты и этанола и 2860 мол/ч воды. Этот выходной технологический поток необходимо разделить на 1000 мол/ч чистого продукта, 2860 мол/ч отходов (воды) и поток, возвращаемый в реактор  $R_2$ .

Полный материальный баланс всех химических компонентов показан на рис. 8.3. Синтезированная операторная схема является результатом оценки ЛПР-технологом матер�альных балансов всех возможных вариантов структуры технологических потоков. Эта операторная схема XTC может служить основой для разработки эффективной по экономическому критерию технологической схемы XTC. В операторную схему входят два ТО селективного разделения: *TOP1* обеспечивает выделение азота и кислорода из смеси четырех компонентов (1, 3, 4, 6), *TOP2*—обеспечивает выделение этанола, уксусной кислоты и воды из смеси четырех компонентов (2, 3, 4, 5).

Пример 8.4. Температура выходного технологического потока реактора, в котором протекает экзотермическая реакция, равна  $300^\circ\text{C}$  ( $t_{rA}^n = 300^\circ\text{C}$ ). По технологическим условиям функционирования XTC указанный ТП  $L_A$  должен быть охлажден до температуры  $t_{rA}^k = 100^\circ\text{C}$ . Для охлаждения ТП  $L_A$  в структуре XTC возможно использовать два ТП  $-L_B$  и  $L_C$ , начальные температуры которых соответственно равны  $t_{xB}^n = 100^\circ\text{C}$  и  $t_{xC}^n = 50^\circ\text{C}$ . По технологическим условиям после нагрева конечные температуры этих двух потоков  $L_B$  и  $L_C$  должны быть равны:  $t_{xB}^k = 200^\circ\text{C}$  и  $t_{xC}^k = 100^\circ\text{C}$ . Для охлаждения потоков в XTC можно также использовать поток хладагента X (охлаждающая вода  $t_{\text{ов}}^n = 20^\circ\text{C}$ ).

Необходимо синтезировать альтернативные варианты технологических схем ТС, состоящих из рекуперативных двухпоточных кожухотрубчатых ТА, т. е. определить число ТА, выбрать структуру технологических потоков между ТА, определить значения поверхностей теплообмена для каждого ТА и температур всех ТП созданной ТС.

В рекуперативный теплообмен в одном двухпоточном ТА могут вступать два ТП, один из которых называют горячим ТП, а другой—холодным ТП. Для значений начальных  $t^n$  и конечных (результатирующих)  $t^k$  температур горячего (холодного) ТП справедливы следующие соотношения:  $t_r^n > t_g^k$  ( $t_{\text{ов}}^n < t_x^k$ ). При синтезе ТС используются следующие основные предпосылки:

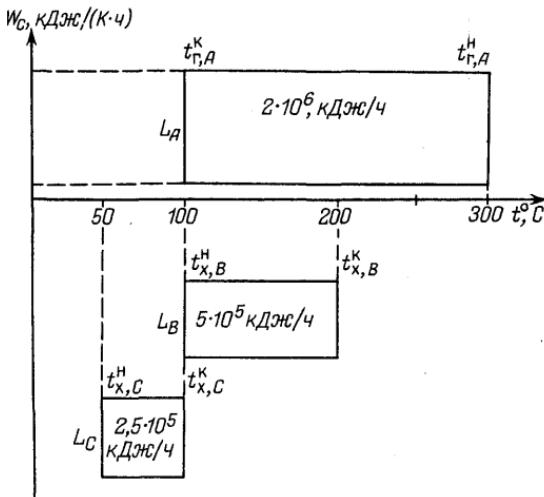


Рис. 8.4. Тепловая диаграмма потоков теплообменной системы:

$L_A$  — горячий поток;  $L_B$  и  $L_C$  — холодные потоки;  $W_c$  — водяные эквиваленты потоков;  $t$  — температура,  $^\circ\text{C}$ ;  $H$  — энталпия потока,  $\text{кДж}/(\text{к}\cdot\text{ч})$

1) процесс теплообмена между двумя ТП в каждом ТА термодинамически реализуется, если минимальное сближение на концах ТА  $\Delta t^* = (t_r^u - t_x^k) \geq \Delta t_{\min}^*$  и  $(t_x^k - t_x^u) > \Delta t_{\min}^*$ ;

2) в процессе теплообмена между двумя ТП с заданными значениями их начальных температур в каждом ТА происходит передача максимально возможного количества тепла  $Q_{\max}$ . Величина  $Q_{\max}$  представляет собой количество теплоты, необходимое для передачи от горячего к холодному потоку, чтобы конечная температура одного из потоков достигла при выполнении условия термодинамической реализуемости процесса теплообмена либо заданного, либо некоторого возможного значения.

При поэлементно-декомпозиционной генерации структуры ТС для выбора пары ТП, которые на каждом этапе поиска решения ИЗС участвуют в рекуперативном теплообмене в одном ТА, рекомендуется применять следующие ЭП:

ЭП-І. Горячий ТП с наибольшей начальной температурой вступает в теплообмен с холодным ТП, имеющим наибольшую конечную температуру, т. е.  $\max t_{r_i}^u \sim \max t_{x_j}^k$  ( $i = 1, N$ ;  $j = 1, M$ ).

ЭП-ІІ. Горячий ТП с наибольшей начальной температурой вступает в теплообмен с холодным ТП, имеющим наименьшую конечную температуру, т. е.  $\max t_{r_i}^u \sim \min t_{x_p}^k$  ( $i = 1, N$ ;  $p = 1, M$ ).

ЭП-ІІІ. Вспомогательный нагрев за счет внешних теплоносителей лучше использовать для холодного ТП с наименьшей конечной температурой.

ЭП-ІV. Вспомогательное охлаждение за счет внешних хладоагентов лучше использовать для горячего ТП с наибольшей начальной температурой.

**Решение.** Для пояснения процедуры поэлементно-декомпозиционной генерации технологических схем ТС целесообразно использовать тепловую диаграмму технологических потоков ТС (рис. 8.4.), на которой ось абсцисс соответствует значениям температуры, а ось ординат — водяному эквиваленту каждого ТП. Площади образующихся на диаграмме прямоугольников соответствуют коли-

честву теплоты каждого ТП, которые соответственно, равны:

$$Q_A = W_A c_A (t_{rA}^k - t_{rA}^*) = 2 \cdot 10^6 \text{ Дж/ч}; \quad Q_B = W_B c_B (t_{xB}^* - t_{xB}^h) = 500 \cdot 10^3 \text{ Дж/ч};$$

$$Q_C = W_C c_C (t_{xC}^* - t_{xC}^h) = 250 \cdot 10^3 \text{ Дж/ч}.$$

Рис. 8.5 поясняет процедуру синтеза ТС с использованием эвристик ЭП-I и ЭП-IV. В процессе синтеза горячий поток разделяется на два параллельных потока ( $Q_{A''} = 1,25 \cdot 10^6 \text{ Дж/ч}$  и  $Q_{A'} = 750 \cdot 10^3 \text{ Дж/ч}$ ). Для охлаждения потока  $L_{A''}$  используется теплота холодных потоков  $L_B$  и  $L_C$ , для охлаждения потока  $L_{A'}$  вспомогательный хладагент  $L_x$  — поток холодного воздуха в аппарате воздушного охлаждения (АВО). Выбор пар обменивающихся теплотой потоков  $\{L_A, L_B\}$  и  $\{L_A, L_C\}$  осуществляется с помощью эвристики ЭП-I. Самая высокотемпературная часть потока — поток  $L_{A''}$  — охлаждается потоком  $L_x$  (см. ЭП-IV). Операторная схема физически реализуемой системы ТС-1 представлена на рис. 8.5,б.

Процедуру синтеза ТС с использованием эвристик ЭП-II и ЭП-IV поясняет рис. 8.6. В результате синтеза получена система ТС-II, в которой процесс теплообмена для пары потоков  $L_A$  и  $L_B$  физически нереализуем, так как мини-

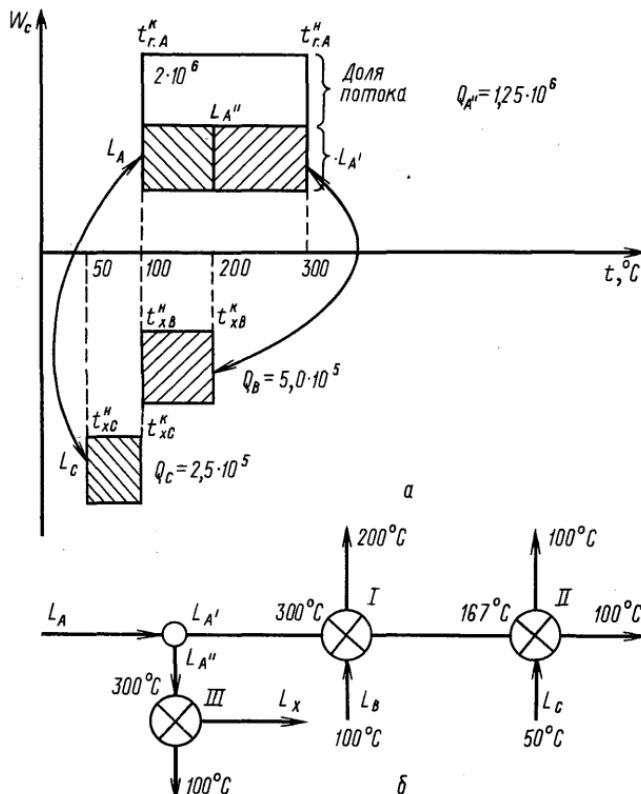


Рис. 8.5. Пояснение процедуры синтеза ТС-I с использованием эвристик ЭП-I и ЭП-IV:

a — тепловая диаграмма; б — операторная схема ТС;  $L_A$  — горячий поток;  $t^*$  — конечная температура потока;  $Q$  — количество теплоты

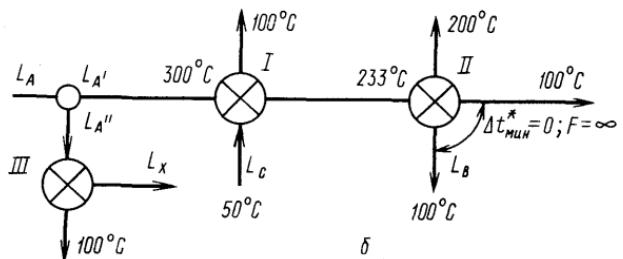
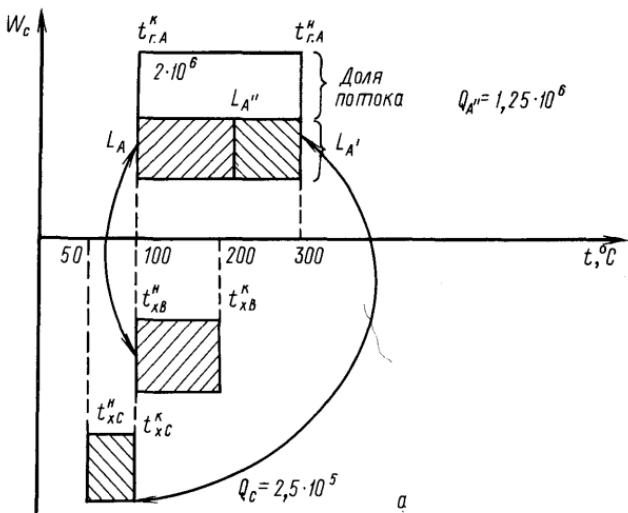


Рис. 8.6. Пояснение процедуры синтеза ТС-II с использованием эвристик ЭП-II и ЭП-IV:

*a*-тепловая диаграмма; *b*-операторная схема физически нереализуемой ТС;  $L_A$ -горячий поток;  $L_B$ ,  $L_C$ -холодные потоки;  $L_x$ -поток хладагента;  $t^h$ -начальная температура потока;  $t^k$ -конечная температура потока;  $Q$ -количество теплоты

мальное сближение температур на концах аппарата II равно нулю ( $\Delta t_{\min}^* = 0$ ), что приводит к выбору ТА бесконечной поверхности ( $F = \infty$ ).

Рис. 8.7. поясняет процедуру синтеза ТС-III с использованием эвристики ЭП-1 без разделения потока  $L_A$  на параллельные части. Синтезированная ТС-III отличается от ТС-І большими приведенными затратами, так как во вспомогательном теплообменнике уменьшается средняя разность температур в ТА, что приводит к увеличению поверхности теплообмена и возрастанию приведенных затрат.

Пример 8.5. Необходимо синтезировать альтернативные варианты СР трехкомпонентной зеотропной смеси  $\{A, B, C\}$  для получения трех целевых продуктов  $A, B, C$ .

Для синтеза СР использовать простые колонны ректификации с кипятильником и дефлегматором, имеющие один ввод питания и два потока продуктов разделения (дистиллят и кубовая жидкость). Компоненты в смеси ранжированы в порядке уменьшения относительных летучестей.

*Решение.* Для получения трех продуктов  $A, B$  и  $C$  необходимо использовать две простые колонны ректификации, в каждой из которых происходит идеальное

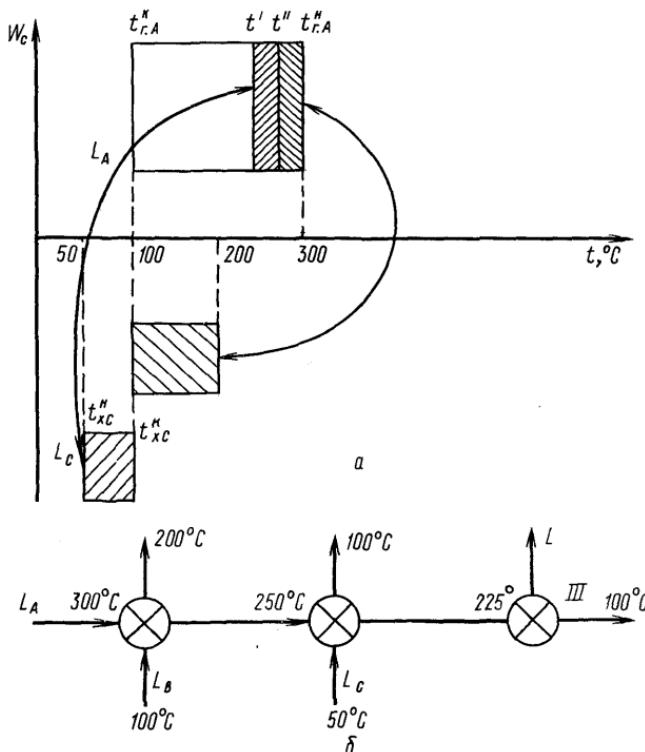


Рис. 8.7. Пояснение к процедуре синтеза ТС-III с использованием эвристического правила ЭП-1 без разделения потоков на параллельные части:

*a*—термовая диаграмма потоков; *б*—операторная схема ТС;  $L_A$ —горячий поток;  $L_x$ —поток хладагента;  $t^*$ —начальная температура потока;  $t^{\prime \prime}$ —конечная температура потока;  $Q$ —количество теплоты

бинарное разделение смеси. Возможны две альтернативные схемы СР: прямая схема СР (рис. 8.8,*a*), в каждой колонне которой полностью отделяется один легкий компонент из смеси, и обратная схема СР (рис. 8.8,*б*), в каждой колонне которой полностью отделяется один тяжелый компонент.

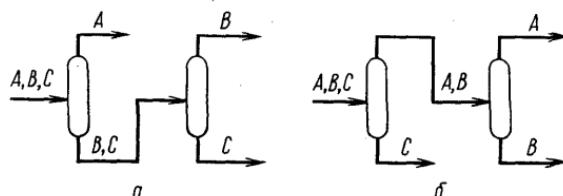


Рис. 8.8. Технологические схемы обычных ректификационных систем разделения трехкомпонентной смеси

### 8.4.1. Основные предпосылки и общая методология

Методологической основой ДП-принципа является поиск семантического решения ИЗС с применением *многоуровневой функционально-поэлементной декомпозиции ИЗС*. Необходимость применения стратегии декомпозиции ИЗС обусловлена принципиальной невозможностью прямого поиска семантического решения ИЗС в целом.

При поиске семантического решения ИЗС осуществляют ее последовательную декомпозицию на ряд более простых специально выделенных задач. Так, при синтезе технологической схемы сложной ХТС сначала можно разделить всю ХТС на некоторое число функциональных подсистем: подсистему подготовки сырья, реакторную подсистему для получения целевого продукта, подсистему выделения целевых продуктов требуемого качества. Затем каждая функциональная подсистема поэтапно декомпозируется до уровня отдельных элементов, или аппаратов.

Основные трудности формализации стратегии функционально-поэлементной декомпозиции состоят в следующем. С одной стороны, на каждом этапе декомпозиции ИЗС необходимо выбирать такой вариант технологической топологии подсистемы, или такой вариант аппаратурного оформления каждого отдельного ХТП (элемента ХТС), который должен соответствовать оптимальному значению выбранного КЭ синтезируемой ХТС. С другой стороны, точное значение оптимума этого критерия может быть известно только тогда, когда технологическая схема ХТС уже синтезирована полностью.

В общем случае многоуровневую декомпозицию ИЗС осуществляют с использованием двух классов стратегий (рис. 8.9):

I – стратегия декомпозиции постановки ИЗС, которая включает два вида декомпозиции: элементарную и произвольную декомпозицию постановки ИЗС;

II – стратегия декомпозиции множества решения ИЗС, которая включает два вида декомпозиции: редуктивно-граничную декомпозицию (РГ-декомпозицию) и перспективно-отсекающую декомпозицию (ПО-декомпозицию).

Стратегия декомпозиции постановки ИЗС реализуется путем перебора множеств решений  $\{S_1\}, \{S_2\}, \dots, \{S_k\}$  некоторых взаимосвязанных подзадач меньшей размерности  $S_1, S_2, \dots, S_k$ , образованных в результате декомпозиционного перехода от данной многомерной ИЗС  $P$ .

Стратегия РГ-декомпозиции реализуется в результате перебора множеств решений  $\{\tilde{P}_1\}, \{\tilde{P}_2\}, \dots, \{\tilde{P}_n\}$  некоторого множества упрощенных по сравнению с ИЗС задач синтеза ХТС  $\tilde{P}_1, \tilde{P}_2, \dots, \tilde{P}_n$ , причем решение каждой упрощенной задачи синтеза



Рис. 8.9. Классы и виды стратегий многоуровневой декомпозиции в декомпозиционно-поисковом принципе синтеза XTC

$\tilde{P}_i \in \{P\}$  становится решением ИЗС, т. е.  $\tilde{P}_i \in \{P_i\} \equiv \tilde{P}_i \in \{P\}$ , только при выполнении некоторых специальных условий.

Стратегия ПО-декомпозиции реализуется путем поиска оптимального решения  $\tilde{P}^*$  в подмножестве рациональных (допустимых), или перспективных решений  $\{E\}$ , образовавшихся при декомпозиции множества возможных решений данной ИЗС  $\{P\}$ , т. е.  $\tilde{P}^* \in \{E\} \subset \{P\}$ .

Для поиска оптимального решения ИЗС на основе ДП-принципа синтеза XTC необходимо совместное использование одного вида стратегии декомпозиции ИЗС и одного вида стратегии декомпозиции решений ИЗС (см. рис. 8.9). Поиск оптимального решения на основе стратегии элементарной декомпозиции ИЗС и стратегии ПО- или РГ-декомпозиции множества решений соответствует математическому представлению задачи синтеза XTC в виде «пространства состояний».

Поиск оптимального решения с использованием стратегии произвольной декомпозиции ИЗС и стратегии ПО- или РГ-декомпозиции множества решений соответствует математическому представлению, или отображению задачи синтеза XTC, основанному на теории «сведения задач к подзадачам» или на теории декомпозиции задач на подзадачи.

ДП-принцип синтеза XTC используется для решения класса ИЗС-I-1 – ИЗС-I-4 структурно-параметрического синтеза XTC, к которому принадлежат многие задачи синтеза ресурсосберегающих неоднородных XTC, а также задач синтеза ТС и задачи

синтеза СР многокомпонентных смесей. Постановка и методы решения задач синтеза ТС и СР с использованием ДП-принципа синтеза ХТС подробно изложены в гл. 9.

Поиск каждого произвольного решения данной ИЗС (некоторой подзадачи меньшей размерности  $S_k$ , образовавшейся при декомпозиции ИЗС, или некоторой упрощенной задачи синтеза  $(\tilde{P}_i) \subset \{P\}$ ) осуществляют с использованием методологии многоуровневой элементарной декомпозиции данной ИЗС (некоторой подзадачи  $S_k$  или некоторой упрощенной задачи синтеза) на совокупность двух подзадач синтеза, одна из которых имеет либо тривиальное решение, либо известное решение.

Задача синтеза ХТС, которая имеет тривиальное или известное решение – это элементарная задача синтеза (ЭЗС).

Тривиальное решение ИЗС соответствует одному технологическому аппарату (например, реактору, ТА, РК и т. д.), т. е. одному элементу ХТС, отвечающему современному уровню аппаратурного оформления ХТП  $\bar{A}$ . Обозначим множество значений переменных и параметров, определяющих постановку ЭЗС –  $P_3$ , которые имеют тривиальное решение, через  $R$ , т. е.  $P_3 = R$ .

Таким образом, если в общем случае для множества  $P$ , определяющего постановку некоторой ИЗС, справедливо соотношение  $P \subseteq R$ , то данная ИЗС является ЭЗС, имеющей тривиальное решение  $P = P_3$ , и в этом случае задача синтеза технологической топологии ХТС не существует. Если  $P \not\subseteq R$ , то возникает одна из задач структурно-параметрического синтеза ХТС (см. раздел 8.1).

Задача синтеза ХТС, не являющаяся ЭЗС, но для которой существует определенное или реализуемое решение, называется произвольной задачей синтеза (ПЗС). Задачу синтеза ХТС, для которой не существует определенного решения при современном уровне аппаратурного оформления ХТП, называют неразрешимой, или нереализуемой задачей синтеза (НЗС).

Необходимые условия возможности решения некоторой ИЗС с применением ДП-принципа:

- 1) данная ИЗС не является ЭЗС, т. е.  $P \not\subseteq R$ ;
- 2) множество решений данной ИЗС –  $\{P\}$  состоит, по крайней мере, из двух альтернативных реализуемых решений  $\mathcal{P}_1$  и  $\mathcal{P}_2$ , т. е.  $\{P\} = \mathcal{P}_1 \cup \mathcal{P}_2$ ,  $\mathcal{P}_1 \cap \mathcal{P}_2 = \emptyset$ ;
- 3) КЭ, вычисляемый на множестве решений ИЗС (некоторой подзадачи  $S_k$ , или некоторой ГЗС  $\tilde{P}_i$ )  $\psi$  имеет аддитивно-сепарационную форму, как по КЭ отдельных ЭЗС  $\psi_j$ , совокупность решений которых образует каждое произвольное решение ИЗС (некоторой подзадачи  $S_k$  или некоторой ГЗС –  $\tilde{P}_i$ )

$$\psi(\mathcal{P}_i \cup \{P\}) = \sum_j \psi_j(\mathcal{P}_{j-i}); \quad (8.2)$$

при

$$\mathcal{P}_{j-i} \subseteq R, \quad \mathcal{P}_i = \bigcup_j \mathcal{P}_{j-i},$$

так и по КЭ  $\psi_k$  произвольных подзадач синтеза  $S_k$ , образовавшихся при декомпозиции ИЗС

$$\psi(\mathcal{P}_i \in \{P\}) = \sum_k \psi_k(S_{k-i}), \quad (8.3)$$

при

$$\mathcal{P}_i = \bigcup_k \{S_{k-i}\}, \quad P \cap S_{k-i} \neq \emptyset, \quad \cap_k S_{k-i} = \emptyset, \quad \{S_{k-i}\} \notin R.$$

#### 8.4.2. Стратегия декомпозиции постановки исходных задач синтеза

Практически декомпозицию постановки ИЗС, или в дальнейшем просто декомпозицию ИЗС осуществляют декомпозицией собственно постановки  $P$  на  $k$  меньших подмножеств, т. е.  $P = \bigcup_k P_k$ ,  $k = \overline{1, n}$  и вводом нового множества переменных декомпозиции  $T_k$ , выбираемых эвристически и соответствующих параметрам возможных внутренних или промежуточных технологических потоков, которые входят в структуру синтезируемой ХТС. В результате этого образуются новые подзадачи синтеза –  $S_k$  ( $k = \overline{1, n}$ ) меньшей размерности, или ИЗС, которые дают такие решения  $\mathcal{P}_k \in \{S_k\}$ , что их объединение является некоторым решением ИЗС  $\mathcal{P}_i$ , т. е.  $\mathcal{P}_i = \bigcup \mathcal{P}_k \in \{P\}$ .

Формализованная запись стратегии декомпозиции ИЗС имеет следующий вид: стратегия элементарной декомпозиции

$$P = \bigcup_k P_k; \quad S_k = P_k \cup T_k; \quad \cap P_k = \emptyset; \quad \forall k (S_k = P_k); \quad \left. \begin{array}{l} \mathcal{P}_i \in \{P\}; \quad \mathcal{P}_i = \bigcup_k \{S_k\}; \end{array} \right\} \quad (8.4)$$

$$P = \bigcup_q P_q; \quad S_q = P_q \cup T_q; \quad \cap P_q = \emptyset; \quad \forall q (S_q \neq P_q); \quad \left. \begin{array}{l} \mathcal{P} \in \{P\}; \quad \mathcal{P}_i = \bigcup_q \{S_q\}, \end{array} \right\} \quad (8.5)$$

где символ  $\forall k (q)$  – квантор общности, обозначающий справедливость некоторого условия для любого  $k (q)$ .

Рассмотрим математическое отображение ДП-принципа синтеза ХТС с использованием различных стратегий многоуровневой декомпозиции ИЗС (см. рис. 8.9). Математическая формулировка процедуры поиска решения задачи синтеза ХТС на основе стратегии элементарной декомпозиции ИЗС представляет собой задачу оптимизации следующего вида:

определить

$$\left. \begin{aligned} \psi^*(P) = \psi(\mathcal{P}^* \in \{P\}) = \text{opt } \psi(P) = \text{opt}_{\{P\}} \left[ \sum_j \psi_{j-i}^*(\mathcal{P}_{j-i}[T_{j-i}]) \right] \\ P = \bigcup_j P_{j-i}, \quad (P_{j-i} \cup T_{j-i}) \cap (P_{(j+1)-i} \cup T_{j-i}) \neq \emptyset, \\ \{\{P_{j-i} \cup T_{j-i}\}\} = \mathcal{P}_{j-i} \subseteq R, \quad \mathcal{P}^* = \bigcup_j \mathcal{P}_{j-i}, \end{aligned} \right\} \quad (8.6)$$

где  $\psi(\psi_{j-i})$  – КЭ функционирования синтезируемой ХТС ( $j$ -й ЭЗС, образовавшейся при  $i$ -ом варианте декомпозиции ИЗС);  $\psi^*(\psi_{j-i}^*)$  – оптимальное значение критерия  $\psi(\psi_{j-i})$ ;  $P$  – множество переменных и параметров, определяющих постановку ИЗС;  $\{P\}$  – множество решений ИЗС;  $P_{j-i}$  – подмножество переменных и параметров при  $i$ -ом варианте декомпозиции ИЗС;  $T_{j-i}$  – множество переменных декомпозиции;  $\mathcal{P}^*$  – оптимальное решение ИЗС;  $\mathcal{P}_{j-i}$  – решение  $j$ -й ЭЗС при  $i$ -ом варианте декомпозиции ИЗС.

В выражении (8.6) оптимум необходимо определить для всех возможных вариантов декомпозиции ИЗС на ЭЗС и для всех значений варьируемых переменных декомпозиции. Так как оптимальные значения критерии эффективности  $\psi_{j-i}^*(\mathcal{P}_{j-i}[T_{j-i}])$  для решений любых  $j$ -ых ЭЗС известны, процесс синтеза ХТС с использованием стратегии элементарной декомпозиции осуществляется по алгоритму Д-1, блок-схема которого представлена на рис. 8.10, а.

**Пример 8.6.** Необходимо рассмотреть возможные альтернативные варианты декомпозиции ИЗС некоторой ХТС на две подзадачи синтеза и записать формулировку условия (8.6), определяющего стратегию синтеза ХТС с использованием теории элементарной декомпозиции. Постановка ИЗС определена множеством:  $P = \{p_1, p_2\}$  (рис. 8.11, а).

**Решение.** Если выбрать в качестве множества переменных декомпозиции  $T = \{t_1, t_2\}$ , то существуют два альтернативных варианта декомпозиции ИЗС на две подзадачи (рис. 8.11, б, в). Для первого варианта декомпозиции ИЗС справедливы соотношения:  $S_I^{(1)} = \{p_1, t_1, t_2\}$  и  $S_{II}^{(1)} = \{p_2, t_1, t_2\}$ , а для второго варианта декомпозиции  $S_I^{(2)} = \{p_1, p_2, t_1, t_2\}$  и  $S_{II}^{(2)} = \{t_1, t_2\} = T$ , где  $S_I^{(2)}(S_{II}^{(2)})$  – множество переменных и параметров первой (второй) подзадачи синтеза (для  $i$ -го варианта декомпозиции ИЗС ( $i = 1, 2$ )).

Для данного примера выражение условия (8.6), определяющего стратегию поиска решения ИЗС, принимает следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} \psi^*(p_1, p_2) = \text{opt} \\ \text{эвристический выбор} \\ \text{варианта декомпозиции} \\ \text{структурь ХТС } (S_I^{(i)}, S_{II}^{(i)}) \end{aligned} \right\} \begin{cases} \text{opt } \{ \psi^*(p_1, t_1, t_2) + \psi^*(p_2, t_1, t_2) \}; \\ t_1, t_2 \\ \text{opt } \{ \psi^*(p_1, p_2, t_1, t_2) + \psi^*(t_1, t_2) \}. \\ t_1, t_2 \end{cases}$$

Математическая формулировка процедуры поиска решения задачи синтеза ХТС на основе стратегии произвольной декомпозиции представляет собой задачу поиска оптимального решения следующего вида:

Выбрать множество переменных декомпозиции Т и декомпозицировать ИЗС на две подзадачи синтеза, определяемые множествами переменных и параметров  $S_1(P_1UT)$  и  $S_2(P_2UT)$

Решить в соответствии с условием (IV.8) задачу оптимизации  
IV.8?

Находится ли решение  $j$ -й подзадачи синтеза внутри области, определяемой современным уровнем аппаратурного оформления ХТП, т.е. определяемой  $P_j \subset R$ ?

да  
Заменить решение  $j$ -й подзадачи синтеза соответствующим элементом (аппаратом) ХТС

Определять начальную оценку для значения оптимума критерия эффективности  $\phi^{(1)}$  на основе опыта высококвалифицированных проектировщиков в соответствии с уровнем аппаратурного оформления ХТП

Синтезировать систему, используя алгоритм синтеза ХТС для случая, когда  $R_j \subset R$ , используя алгоритм  $D=1$

нет  
Определить, сравнимы ли  $\phi^{(1)}$  с  $\sum E_j P_j$  на всех уровнях декомпозиции ИЗС

Исправить значение оценки  $\phi^{(1)}$  для оптимального значения критерия эффективности ХТС

да

Остались ли какие-либо подзадачи синтеза?

Технологическая топология ХТС синтезирована

да

Технологическая топология ХТС синтезирована

а

б

Рис. 8.10. Блок-схемы алгоритмов синтеза ХТС с применением теории элементарной декомпозиции:

$\alpha$ -алгоритм Д-1 (для любой  $j$ -й подзадачи синтеза, образовавшейся при декомпозиции ИЗС, справедливо условие  $P_j \subset R$ );  $\beta$ -алгоритм Д-2 итерационная коррекция оценок  $\Psi^{(0)}$  для отдельных значений критерия эффективности  $\Psi^*$

определить

$$\left. \begin{aligned} \Psi^*(P) &= \Psi(\mathcal{P}^* \in \{P\}) = \underset{\{P\}}{\text{opt}} \Psi(P) = \underset{S_{q-i}}{\text{opt}} \left[ \sum_q \Psi_{q-i}^*(\{S_{q-i}\}) \right] = \\ &= \underset{P_{q-i}, T_{q-i}}{\text{opt}} \left[ \sum_q \Psi_{q-i}^*(\{P_{q-i} \cup T_{q-i}\}) \right] = \underset{P_{q-i}}{\text{opt}} \left\{ \underset{T_{q-i}}{\text{opt}} \left[ \sum_q \Psi_{q-i}^*(\{P_{q-i} \cup T_{q-i}\}) \right] \right\} \end{aligned} \right\} \quad (8.7)$$

при наличии ограничений

$$P = \bigcup_q P_{q-i}, \quad S_{q-i} = P_{q-i} \cup T_{q-i}, \quad \bigcap_q P_{q-i} = \emptyset,$$

$$\{S_{q-i}\} = \{(P_{q-i} \cup T_{q-i})\} = \mathcal{P}_{q-i} \notin R, \quad \mathcal{P}^* = \bigcup_q \mathcal{P}_{q-i}$$

где  $\Psi(\Psi_{q-i})$  – КЭ функционирования синтезируемой ХТС ( $q$ -й подзадачи, образовавшейся при  $i$ -ом варианте декомпозиции ИЗС);  $\Psi^*(\Psi_{q-i}^*)$  – оптимальное значение критерия  $\Psi(\Psi_{q-i})$ ;  $S_{q-i}$  – множество переменных и параметров  $q$ -й подзадачи синтеза ХТС, образовавшейся при  $i$ -ом варианте декомпозиции ИЗС;  $T_{q-i}$  – множество переменных декомпозиции;  $\mathcal{P}_{q-i}$  – решение  $q$ -й подзадачи синтеза,  $\mathcal{P}^*$  – оптимальное решение.

Задачи определения оптимального значения КЭ синтезируемой ХТС по выражению (8.6) или (8.7) представляют собой типичные двухуровневые задачи оптимизации (см. раздел 7.7), включающие «задачу внутренней оптимизации» и «задачу внешней оптимизации». Задача внутренней оптимизации [выражения (8.6) или (8.7)], или задача оптимизации параметров ХТС состоит

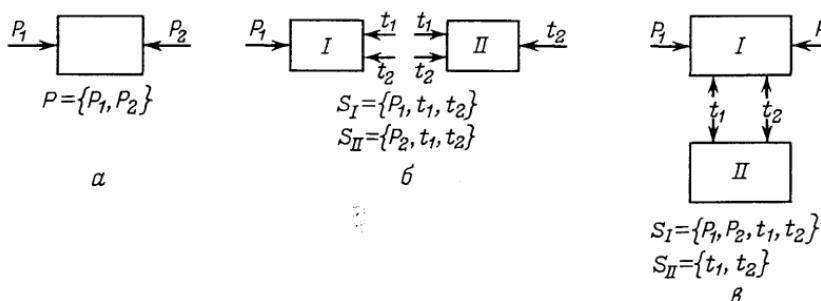


Рис. 8.11. Обобщенные иконографические модели некоторой исходной задачи синтеза (a) и альтернативных вариантов декомпозиции ИЗС ХТС (б, в):

$P$  – множество технологических и (или) конструкционных параметров;  $P_1 (P_2)$  – подмножество  $P$ ;  $S_I (S_{II})$  – множество переменных и параметров  $I (II)$  подзадач синтеза;  $t_1 (t_2)$  – подмножества  $T$  ( $T$  – множество переменных декомпозиции)

в определении значений переменных эвристически выбранных промежуточных технологических потоков  $T^*$ , при которых суммарная величина оптимальных значений КЭ подсистем  $\psi_{q-i}^*(\{P_{q-i} \cup T_{q-i}\})$  имеет оптимум. Задача внешней оптимизации [выражения (8.6) или (8.7)] состоит в определении оптимального варианта декомпозиции ИЗС  $P = \cup P_{q-i}$ , при котором

$$\psi^*(P) = \text{opt } \Psi(P) = \psi^*\left(\bigcup_q \{S_{q-i}\}\right) = \text{opt } \Psi_i\left[\bigcup_{q-i} \{(P_{q-i} \cup T_{q-i}^*)\}\right],$$

и представляет собой задачу эвристического выбора оптимальной структуры технологических связей, или технологической топологии ХТС  $G$  при оптимальных значениях переменных декомпозиции  $T^*$ .

Уравнения (8.6) и (8.7) полностью определяют стратегию поиска решения ИЗС. Решение задач оптимизации (8.6) и (8.7) необходимо осуществлять как с использованием методов математического программирования, так и с использованием теории упорядоченного перебора решений.

Так как для множества  $S_q$ , определяющего постановку  $q$ -й подзадачи синтеза, образовавшейся при произвольной декомпозиции ИЗС, справедливо соотношение  $\{S_q\} \notin R$ , то величина оптимума  $\psi_q^*(\{S_q\})$  не может быть заранее известна. В этом случае точное значение величины оптимума  $\psi_q^*(\{S_q\})$  можно заменить некоторой приближенной оценкой. Эту приближенную оценку  $\psi_q^{(1)}$  для оптимального значения  $\psi_q^*(\{S_q\})$  можно определить либо эвристически, либо на основе опыта, накопленного ЛПР при синтезе определенного класса ХТП и ХТС. Используя оценку  $\psi_q^{(1)}$  для оптимального значения  $\psi_q^*(\{S_q\})$ , процесс синтеза ХТС на основе стратегии произвольной декомпозиции осуществляют по итерационному алгоритму – алгоритму Д-П, блок-схема которого представлена на рис. 8.10, б. Для решения ИЗС, полученного с помощью алгоритма Д-П, необходимо проверить применимость использованной приближенной оценки  $\psi_q^{(1)}$  как для синтезированной системы в целом, так и для всех подсистем ХТС, образовавшихся на каждом этапе декомпозиции ИЗС. Если на всех этапах декомпозиции  $\psi_q^{(1)}(\{S_q\}) = \psi^*(\{S_q\})$ , то синтез технологической топологии ХТС закончен. В противном случае на основании полученных результатов синтеза ХТС следует итерационным методом откорректировать предварительно выбранные значения оценки  $\psi_q^{(i)}$ , обеспечивая сходимость последовательности оценок  $\psi_q^{(1)}, \psi_q^{(2)}, \dots, \psi_q^{(n)} = \psi_q^*$  к величине  $\psi_q^*$ . Иными словами, в результате конечного числа шагов итерационного алгоритма синтеза ХТС должно обеспечиваться выполнение неравенства  $|\psi_q^{(n)} - \psi_q^*| < \varepsilon$  при  $n > N$ , где  $\varepsilon$  – принятая точность вычислений;  $N$  – некоторое конечное число;  $n$  – число шагов итерационного алгоритма синтеза.

Применение итерационного алгоритма стратегии произволь-

ной декомпозиции ИЗС при синтезе ХТС связано с возможностью возникновения ошибок двух типов: 1) выбранные численные значения переменных декомпозиций  $T$  могут не соответствовать их оптимальным значениям; 2) выбранные множества переменных и параметров  $S_{q-i} = P_{q-i} \cup T_{q-i}$  и  $S_{q+1} = P_{q-1} \cup T_{q-i}$ , определяющих постановку произвольных подзадач синтеза, образованных при декомпозиции ИЗС, приводят к синтезу технологической топологии подсистем, совокупность которых не обеспечивает оптимальной технологической топологии ХТС в соответствии с существующим уровнем аппаратурного оформления ХТП.

При решении задачи синтеза ХТС оба типа ошибок могут быть выявлены по наличию рассогласования

$$|\psi^{(i)} - \psi_{\text{ХТС}}^*| > \varepsilon, \quad (8.8)$$

где  $\psi^{(i)}$  – предварительная оценка оптимального значения КЭ;  $\psi_{\text{ХТС}}^* = \sum_q \psi_q^*(\{S_q\})$  – значение оптимума критерия эффективности синтезированной ХТС.

Ошибки первого типа приводят к неправильному определению оптимальных значений параметров синтезированной ХТС с определенной технологической топологией. Эти ошибки можно легко устранить, используя различные методы оптимизации для решения внутренней задачи оптимизации:

$$\psi^* = \operatorname{opt} \sum_q \psi_q^*(\{P_{q-i} \cup T_{q-i}\}). \quad (8.9)$$

Ошибки второго типа приводят к синтезу ХТС с неоптимальной технологической топологией. Дополнительно заметим, что поскольку при использовании стратегии произвольной декомпозиции ИЗС вместо точного значения оптимума КЭ  $\psi^*$  используется его оценка  $\psi^{(i)}$ , полученный вариант декомпозиции ИЗС может привести к неоптимальному решению всей задачи синтеза ХТС. Как правило, такая ошибка приводит к несовпадению действительного значения оптимума КЭ синтезированной ХТС с использованной ранее оценкой. Однако эта ситуация может и не произойти, если оценка  $\psi^{(i)}$  совпадает с оптимумом КЭ некоторой ХТС с фиксированной неоптимальной технологической топологией, к синтезу которой может привести применение алгоритма, и данная ХТС будет принята за оптимальную. Таким образом, совпадение принятой оценки  $\psi^{(i)}$  оптимального значения КЭ с ее истинными значениями для синтезированной ХТС  $\psi^*$  в общем случае не гарантирует, что полученное с использованием стратегии произвольной декомпозиции ИЗС решение является оптимальным в глобальном смысле.

В заключение еще раз подчеркнем, что успешное использование стратегии произвольной декомпозиции для синтеза ХТС возможно, если будут разработаны: алгоритмы выбора множест-

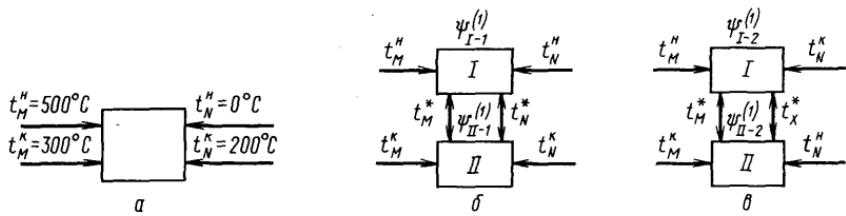


Рис. 8.12. Постановка исходной задачи синтеза (a), первый (б) и второй (в) варианты декомпозиции ИЗС:

$t_{M(N)}^{h(k)}$  – начальная (конечная) температура технологического потока ( $M$  – горячего,  $N$  – холодного)

ва переменных декомпозиций  $T$  для ИЗС любой произвольной ХТС; методы выбора начальных оценок для оптимального значения КЭ любой синтезируемой ХТС; алгоритмы коррекции начальной оценки для оптимума КЭ.

Для решения указанных задач, возникающих при разработке методов синтеза ХТС на основе стратегии произвольной декомпозиции, необходимо широко использовать методы эвристического программирования, специальные методы решения экстремальных комбинаторных задач, методы адаптации, методы целочисленного (дискретного) программирования, методы статистического моделирования и другие математические методы общей теории систем и теории исследования операций.

Пример 8.7. Необходимо определить, каким образом влияет выбор варианта декомпозиции ИЗС и величины предварительной оценки оптимального значения КЭ  $\psi^{(i)}$  на результат решения задачи синтеза некоторой ТС при использовании теории элементарной декомпозиции и итерационного алгоритма Д-И.

Требуется синтезировать ТС для осуществления операции теплообмена между двумя технологическими потоками  $L_1$  и  $L_2$ , которая обеспечивает минимальную величину капитальных затрат. Постановка ИЗС данной ТС определена множеством параметров состояния двух потоков:

$$L_1 = \{W_1; t_M^h = 500^\circ\text{C}; t_M^k = 300^\circ\text{C}\},$$

$$L_2 = \{W_2; t_N^h = 0^\circ\text{C}; t_N^k = 200^\circ\text{C}\},$$

где  $W_i$  – массовый расход;  $t_i^h(t_i^k)$  – начальная (конечная) температура  $i$ -го ТП (горячего –  $M$ , холодного –  $N$ ). Обобщенная иконографическая модель ИЗС теплообменной системы изображена на рис. 8.12. Постановка ИЗС включает следующие дополнительные ограничения:

1) необходимо использовать ТА, для которых максимальный перепад температур каждого теплоносителя (технологического потока)  $\max \Delta t_M = \max \Delta t_N = = (t_M^h - t_M^k) = (t_N^h - t_N^k) = 50^\circ\text{C}$ , а минимальный перепад температур теплоносителей на входе (выходе) теплообменника  $\Delta t \min (t_M^h - t_N^k) = 10^\circ\text{C}$ ;

2) капитальные затраты на один ТА равны  $\bar{\Pi} = dF^{0.5}$ , где  $F$  – поверхность теплообмена;  $d$  – некоторый коэффициент.

Для каждого ТА тепловая нагрузка равна  $Q = WC \cdot 50$ , а уравнение теплопередачи имеет вид  $Q = KF \max(t_M - t_N)$ , где  $K$  – коэффициент теплопередачи. Выражение для величины капитальных затрат, если величина  $K = \text{const}$ , можно преобразовать к следующему виду:

$$\bar{\Pi} = d \{Q/[K \max(t_M - t_N)]\}^{0.5} = K'/\{\max(t_M - t_N)\}^{0.5}. \quad (1)$$

Для ТС, состоящей из  $N$  теплообменников, в соответствии с уравнением (1) можно записать выражение КЭ следующим образом:

$$\psi^* = \min \sum_{j=1}^N \Pi_j = K' \min \sum_j [1/(\max \Delta t)^{0.5}]_j, \quad (2)$$

где  $\Delta t = (t_M - t_N)$ .

*Решение.* Чтобы приступить к решению ИЗС с использованием итерационного алгоритма Д-И, необходимо найти оценку оптимума КЭ для тепловой системы в зависимости от значений температур горячего и холодного потоков. В качестве первой оценки  $\psi^{(1)}$  примем выражение, которое можно получить простой экстраполяцией функции (2):

$$\psi^{(1)} = \min \sum [K'/\{\max(t_M - t_N)\}^{0.5}]_j, \quad (3)$$

где  $j$  – все возможные варианты взаимодействия горячих и холодных потоков для каждого этапа декомпозиции ИЗС.

Для осуществления декомпозиции ИЗС используем множество переменных декомпозиции  $T = \{t_M^*, t_N^*\}$ , причем по условию ИЗС  $\min(t_M^* - t_N^*) \geq 10^\circ\text{C}$ . Альтернативные варианты декомпозиции данной ИЗС на две подзадачи (I и II) синтеза представлены в виде обобщенных иконографических моделей на рис. 8.12, б, в. Выбор между двумя альтернативными вариантами (1 и 2) декомпозиции ИЗС (рис. 8.12, б, в) на две подзадачи синтеза (I и II) осуществим в результате решения задачи оптимизации в соответствии с условием (8.6):

$$\text{opt } \psi^{(1)} = \min \begin{cases} \min \{\psi_{1-1}^{(1)}[500; t_M^*; 0; t_N^*] + \psi_{II-1}^{(1)}[t_M^*; 300; t_N^*; 200]\}; \\ t_M^*, t_N^* \\ \min \{\psi_{1-2}^{(1)}[500; t_M^*; 200; t_N^*] + \psi_{II-2}^{(1)}[t_M^*; 300; t_N^*; 0]\}. \\ t_M^*, t_N^* \end{cases} \quad (4)$$

Подставляя в (4) для решения подзадач значения  $\psi^{(1)}$  из уравнения (3), а также учитывая что  $500^\circ\text{C} > t_M^* > 300^\circ\text{C}$  и  $200^\circ\text{C} > t_N^* > 0^\circ\text{C}$ , верхнюю строчку выражения (4) можно преобразовать к следующему виду:

$$\begin{aligned} \psi_1^{(1)} &= \min_{t_M^*, t_N^*} \left\{ \frac{K'}{(\max[(500 - 0), (500 - t_N^*), (t_M^* - 0), (t_M^* - t_N^*)])^{0.5}} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{K'}{(\max[(300 - t_N^*), (t_M^* - t_N^*), (300 - 200), (t_M^* - 200)])^{0.5}} \right\} = \\ &= \min_{t_M^*, t_N^*} K' \left\{ \frac{1}{500^{0.5}} + \frac{1}{(t_M^* - t_N^*)^{0.5}} \right\}. \end{aligned} \quad (5)$$

Нетрудно определить, что минимальное значение для выражения (5) возможно тогда, когда  $(t_M^* - t_N^*) = \max$ , т. е. в соответствии с дополнительным ограничением ИЗС при  $t_M^* = 450^\circ\text{C}$ , а  $t_N^* = 50^\circ\text{C}$ . В этом случае  $\psi_1^{(1)} = K' \cdot 0.095$ .

Осуществляя аналогичные преобразования для нижней строчки выражения (4), получают

$$\begin{aligned} \psi_2^{(1)} &= \min_{t_M^*, t_N^*} \left\{ \frac{K'}{(\max[(500 - 200), (500 - t_N^*), (t_M^* - 200), (t_M^* - t_N^*)])^{0.5}} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{K'}{((\max[(300 - t_N^*), (300 - 0), (t_M^* - t_N^*)(t_M^* - 0)])^{0.5}} = \right. \end{aligned}$$

$$= \min_{t_M^*, t_N^*} \left\{ \frac{K'}{\left[ (500 - t_N^*) \right]^{0.5}} + \frac{K'}{\left[ (t_M^* - 0) \right]^{0.5}} \right\} = K' \cdot 0,1 \quad (6)$$

при  $t_M^* = 400^\circ\text{C}$  и  $t_N^* = 100^\circ\text{C}$ . Следовательно

$$\psi^{(1)} = \min_{(1; 2)} \psi^{(1)} = \min_{(1; 2)} \left\{ \begin{array}{l} \psi_1^{(1)} \\ \psi_2^{(1)} \end{array} \right\} = \psi_1^{(1)}. \quad (7)$$

При рассчитанных из выражения (4) значениях переменных декомпозиции  $T = \{t_M^* = 450^\circ\text{C}; t_N^* = 50^\circ\text{C}\}$  в соответствии с дополнительными ограничениями ИЗС на первом шаге алгоритма Д-II образованная при декомпозиции ИЗС подзадача синтеза I может быть решена с использованием одного теплообменника (рис. 8.13, а). Проводя последовательную декомпозицию подзадачи II по алгоритму Д-II, определяем, что синтезированная тепловая система имеет операторную схему, представленную на рис. 8.13, б.

Чтобы убедиться в том, что использование алгоритма Д-II дает правильное решение задачи синтеза, необходимо сравнить значение принятых оценок  $\psi^{(1)}$  оптимума КЭ с действительным значением оптимума КЭ  $\psi^*$  для синтезированной ТС (рис. 8.13, б). Как видно из табл. 8.2, принятая предварительная оценка отличается от действительного значения оптимума КЭ на каждом этапе декомпозиции ИЗС тем значительнее, чем больше ТА входит в синтезируемые подсистемы.

Принятая оценка  $\psi^{(1)}$  по выражению (3), помимо этого, дает явно абсурдный результат (капитальные затраты на систему уменьшаются с возрастанием числа теплообменников!?).

Следовательно, необходимо осуществить коррекцию величины принятой оценки КЭ. Возьмем в качестве оценки КЭ величину

$$\psi^{(2)} = \left| \frac{t_M^u - t_M^k}{50} \right|^{1,2} \left\{ \min \frac{K'}{\left( \max[t_M^u - t_N^u] \right)^{0.5}} \right\}, \quad (8)$$

где  $\left| (t_M^u - t_M^k)/50 \right|^{1,2}$  – число ТА, соответствующих условию дополнительного ограничения ИЗС и необходимых для выполнения технологической операции охлаждения горячего потока ( $t_M^u - t_M^k$ ). Эта оценка более реалистична.

В соответствии с условием (8.6) при синтезе ТС по алгоритму Д-II, используя выражение (6) для оценки  $\psi^{(2)}$ , необходимо решить следующую задачу оптимизации:

$$\text{opt } \psi^{(2)} = \min_{t_M^*, t_N^*} \left\{ \begin{array}{l} \min_{t_M^*, t_N^*} \left\{ K' \left[ \left| \frac{500 - t_M^*}{50} \right|^{1,2} \frac{1}{500^{0.5}} + \left| \frac{t_M^* - 300}{50} \right|^{1,2} \frac{1}{(t_M^* - t_N^*)^{0.5}} \right] \right\} \\ \min_{t_M^*, t_N^*} \left\{ K' \left[ \left| \frac{500 - t_M^*}{50} \right|^{1,2} \frac{1}{(500 - t_N^*)^{0.5}} + \left| \frac{t_M^* - 300}{50} \right|^{1,2} \frac{1}{(t_M^* - 0)^{0.5}} \right] \right\} \end{array} \right\} \quad (9)$$

Из выражения (9) следует, что  $\min \psi_1^{(2)} = K' \cdot 0,232$ , а  $\min \psi_2^{(2)} = K' \cdot 0,230$ , т. е.  $\text{opt } \psi^{(2)} = \min \psi_2^{(2)}$ , при  $t_M^* = t_{M-1}^u = 450^\circ\text{C}$ , а  $t_N^* = t_{N-1}^u = 150^\circ\text{C}$ .

Таким образом, используя более реалистическую оценку  $\psi^{(2)}$ , по алгоритму Д-II на первом этапе декомпозиции ИЗС согласно выражению (9) выбирают в качестве оптимального второй вариант декомпозиции ИЗС на две подсистемы (рис. 8.12, б). При этом решение для первой подзадачи синтеза (I) представляет собой один теплообменник ( $t_M^u = 500^\circ\text{C}$ ;  $t_M^* = t_{M-1}^u = 450^\circ\text{C}$ ;  $t_N^* = t_{N-1}^u = 150^\circ\text{C}$ ;  $t_N^k = 200^\circ\text{C}$ ) (рис. 8.14, а). Операторная схема синтезированной с помощью алгоритма Д-II системы при использовании оценки  $\psi^{(2)}$  представлена на рис. 8.14, б. В табл. 8.3 сравниваются предварительно выбранная оценка  $\psi^{(2)}$  и действительное

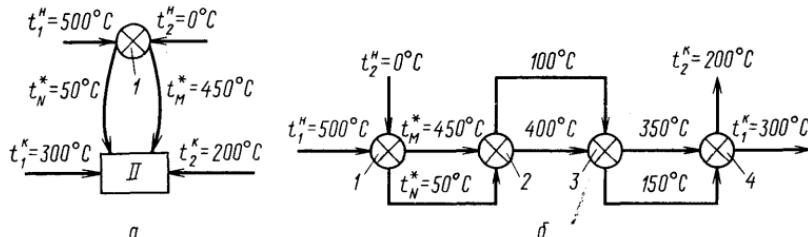


Рис. 8.13. Результаты применения алгоритма Д-II для решения ИЗС с использованием приближенной оценки  $\Psi^{(1)}$  критерия эффективности:

*a* – теплообменный аппарат, соответствующий решению 1 подзадачи синтеза по первому варианту декомпозиции (см. рис. IV-5, б); *б* – операторная схема синтезированной ТС: 1–4 – теплообменники

оптимальное значение КЭ для синтезированной тепловой системы, которое определяется по выражению (2).

Результаты, приведенные в табл. 8.3, свидетельствуют о том, что задача синтеза ТС с использованием алгоритма Д-II решена правильно.

Таблица 8.2. Сравнение оценки значения оптимума КЭ ( $\Psi^{(1)}$ ) с оптимальным значением КЭ синтезированной ТС ( $\Psi^*$ )

Этап декомпозиции	Критерий эффективности	
	оценка оптимума $\Psi^{(1)} = A'/[\max(t_M - t_N)]^{0.5}$	оптимальное значение $\Psi^* = \sum_j A' / [\max(t_{Mj} - t_{Nj})]^{0.5}$
1,2,3,4 (подзадача I)	$A'/500^{0.5} = A' \cdot 0,046$	$A'[1/500^{0.5} + 1/400^{0.5} + 1/300^{0.5} + 1/200^{0.5}] = A' \cdot 0,225$
2,3,4 (подзадача II)	$A'/400^{0.5} = A' \cdot 0,050$	$A'[1/400^{0.5} + 1/300^{0.5} + 1/200^{0.5}] = A' \cdot 0,179$
3,4 (подзадача III)	$A'/300^{0.5} = A' \cdot 0,058$	$A'[1/300^{0.5} + 1/200^{0.5}] = A' \cdot 0,129$
4 (подзадача IV)	$A'/200^{0.5} = A' \cdot 0,071$	$A'/200^{0.5} = A' \cdot 0,071$

Таблица 8.3. Сравнение оценки значения оптимума КЭ ( $\Psi^{(2)}$ ) с оптимальным значением КЭ синтезированной системы ( $\Psi^*$ )

Этап декомпозиции	Критерий эффективности ТС	
	$\Psi^{(2)} =  (t_M'' - t_M^*)/50 ^{1.2} \times A' / [\max(t_M - t_N)]^{0.5}$	$\Psi^* = \sum_j \Pi_j = \sum_j A' / [\max(t_{Mj} - t_{Nj})]^{0.5}$
1,2,3,4 (подзадача I)	$A'(200/50)^{1.2} (1/(500)^{0.5}) = A'(0,238)$	$A'(1/(350)^{0.5} + 1/(350)^{0.5} + 1/(350)^{0.5}) = A'(0,214)$
2,3,4 (подзадача II)	$A'(150/50)^{1.2} (1/(450)^{0.5}) = A'(0,226)$	$A'(1/(350)^{0.5} + 1/(350)^{0.5} + 1/(350)^{0.5}) = A'(0,161)$
3,4 (подзадача III)	$A'(100/50)^{1.2} (1/(400)^{0.5}) = A'(0,201)$	$A'(1/(350)^{0.5} + 1/(350)^{0.5}) = A'(0,106)$
4 (подзадача IV)	$A'(50/50)^{1.2} (1/(350)^{0.5}) = A'(0,059)$	$A'(1/(350)^{0.5}) = A'(0,059)$

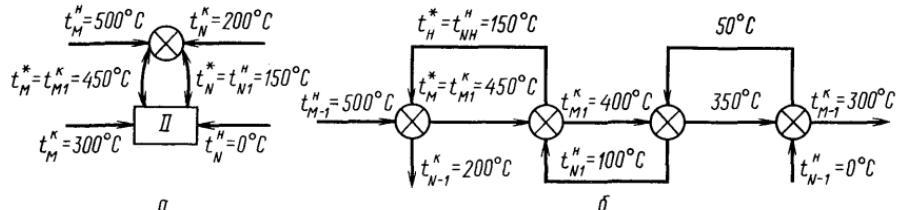


Рис. 8.14. Результаты применения алгоритма Д-II с использованием приближенной оценки  $\Psi^{(2)}$  критерия эффективности:

*a* – теплообменный аппарат, соответствующий решению I подзадачи синтеза по второму варианту декомпозиции ИЗС (см. рис. IV-5, *a*); *b* – операторная схема синтезированной ТС

### 8.4.3. Редуктивно-граничная декомпозиция множества решений исходных задач синтеза

Границная задача синтеза (ГЗС) – это задача синтеза ХТС, представляющая собой упрощенную по сравнению с ИЗС задачу, постановка которой  $\tilde{P}_i$  отличается от постановки ИЗС  $P$  введением подмножества дополнительных ослабляющих ограничений или условий. Решение некоторой ГЗС становится решением ИЗС только при выполнении указанных ниже специальных условий. Допустим, что математическая формулировка некоторой ИЗС имеет следующий вид:

определить

$$\psi^*(\mathcal{P}) = \min_{\mathcal{P} \in \{P\}} \psi(\{P\}) \quad \text{при } \bar{H}(P) \geq 0, \quad (8.10)$$

где  $\mathcal{P}$  – допустимое или реализуемое решение ИЗС;  $\bar{H}$  – вектор-функция ограничений задачи.

Заменим ИЗС  $P$  упрощенной задачей синтеза  $\tilde{P}_1$ , которая будет представлять собой ГЗС, т. е. при введе дополнительных ослабляющих ограничений, или условий, будет ограничивать ИЗС в том смысле, что удовлетворяется следующее «граничное» свойство: существует не менее одного оптимального решения ИЗС  $\mathcal{P}^* \in \{P\}$ , когда  $\mathcal{P}^*$  реализуемо для задачи  $\tilde{P}_1$  и значение КЭ для этой задачи  $\psi_1(\mathcal{P}^*) \leq \psi(\mathcal{P}^*)$ . Предположим, определено оптимальное решение  $\tilde{\mathcal{P}}_1^*$  для задачи  $\tilde{P}_1$ . Тогда нетрудно показать: если это оптимальное решение  $\tilde{\mathcal{P}}_1^*$  удовлетворяет следующим достаточным условиям оптимальности:

$$\tilde{\mathcal{P}}_1^* \in \{P\}; \quad (8.11) \quad \psi_1(\tilde{\mathcal{P}}_1^*) = \psi(\tilde{\mathcal{P}}_1^*), \quad (8.12)$$

то  $\tilde{\mathcal{P}}_1^* = \mathcal{P}^*$ , т. е.  $\tilde{\mathcal{P}}_1^*$  также является оптимальным решением ИЗС.

Если решение  $\tilde{\mathcal{P}}_1^*$  не удовлетворяет условиям (8.11) и (8.12), то можно ввести в формулировку ИЗС дополнительные ослабляющие ограничения. Если  $\tilde{\mathcal{P}}_1^* \notin \{P\}$ , то возможно модифицировать

область оптимизации или усилить ограничения ИЗС таким образом, чтобы  $\tilde{P}_1^*$  стало нереализуемым решением для задачи  $\tilde{P}_1$ . Если  $\psi_1(\tilde{P}_1^*) < \psi(\tilde{P}_1^*)$ , то можно попытаться видоизменить КЭ задачи  $\tilde{P}_1$  таким образом, чтобы либо величина КЭ для  $\tilde{P}_1^*$  возросла, либо  $\tilde{P}_1^*$  стало неоптимальным решением  $\tilde{P}_1$ , либо обеспечить другие предпосылки для выполнения условия (8.12).

Рассмотрим примеры формирования ГЗС для данных ИЗС в соответствии с достаточными условиями (8.3) и (8.4). Например, предположим, что ГЗС была получена в результате ослабления ограничений в ИЗС по нормам расхода ТЭР в некоторой синтезируемой ХТС и что ГЗС решена. Предположим далее, что решение ГЗС нереализуемо применительно к ИЗС. Например, решение ГЗС представляет собой такую технологическую схему, расход ТЭР в которой превышает установленную в ИЗС норму. Ограничение по нормам расхода ТЭР является критическим и, возможно, оно не будет соответствовать еще неизвестному оптимальному решению ИЗС. Следовательно, необходимо создавать такие новые ГЗС, которые включают ограничение по нормам расхода ТЭР, но эти ГЗС должны быть проще в отношении некоторых других критических ограничений ИЗС.

В ряде случаев можно даже полностью изменить постановку ИЗС с тем, чтобы получить более простую ГЗС. Например, ИЗС – это задача разработки технологической схемы СР, обеспечивающей выделение легкого углеводорода из смеси нескольких более тяжелых углеводородов. Допустимая ГЗС может представлять собой задачу отделения легкого углеводорода от одного более тяжелого углеводорода. Информация, полученная при решении этой ГЗС, может позволить исключить сложную задачу разработки технологической схемы СР большого числа углеводородов на некоторой определенной стадии синтеза оптимальной СР многокомпонентной смеси (МКС).

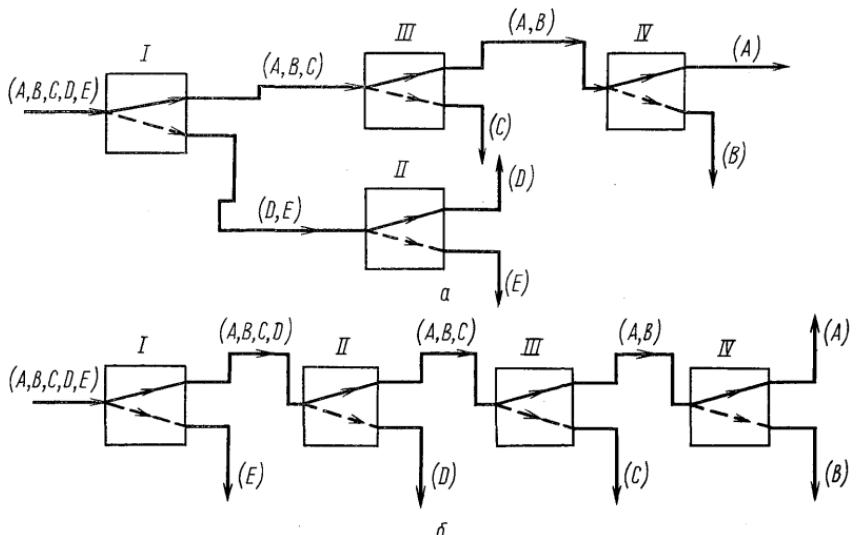


Рис. 8.15. Операторные схемы, соответствующие решению граничной задачи синтеза  $P = (A, B, C)$  для исходной задачи синтеза систем ректификации пятикомпонентной смеси  $A, B, C, D, E$

I–IV типовые операторы колонны разделения

Для ИЗС технологической схемы СР зеотропной многокомпонентной смеси ГЗС может также представлять собой задачу синтеза некоторого множества вариантов технологических схем СР, отображаемых множеством специальных положений точек деления исходной ранжированной МКС. Точки деления соответствуют в схеме СР колоннам ректификации, на выходе которых образуются требуемые смеси или продукты в синтезируемой системе (более подробно см. раздел 9.4). Например, для ИЗС технологической схемы СР пятикомпонентной смеси  $(ABCDE)$  на пять однокомпонентных продуктов  $(A)$ ,  $(B)$ ,  $(C)$ ,  $(D)$  и  $(E)$  на основе применения простых РК граничная задача синтеза  $\tilde{P}_1 = (ABC)$  представляет собой задачу синтеза технологических схем СР, отображаемых различными положениями точек деления, обеспечивающих образование смеси  $(ABC)$  из исходной МКС  $(ABCDE)$  при получении пяти однокомпонентных продуктов  $(A)$ ,  $(B)$ ,  $(C)$ ,  $(D)$  и  $(E)$ . Решение ГЗС  $\tilde{P}_1 = (ABC)$  соответствует двум вариантам технологических схем систем разделения смеси  $(ABCDE)$ , операторные схемы которых представлены на рис. 8.15.

РГ-декомпозиция множества решений ИЗС реализуется на основе сведения поиска оптимального решения ИЗС к поиску во множестве решений некоторого множества ГЗС, к которому при определенных граничных условиях может быть сведена данная ИЗС. Стратегия многоуровневой декомпозиции множества ГЗС, которая обеспечивает отыскание оптимального решения ИЗС за конечное число вычислений, должна разрабатываться на основе использования теории упорядоченного перебора решений (см. раздел 8.8).

#### **8.4.4. Стратегия перспективно-отсекающей декомпозиции множества решений ИЗС**

Стратегия ПО-декомпозиции базируется на основных идеях метода ветвей и границ.

Кратко поясним основную сущность этого метода. Пусть, например, требуется найти минимум функции  $\Psi = f(X)$  при условии  $X \in G$ , где  $G$  – представляет собой множество возможных решений. Предполагается, что существует метод нахождения нижней оценки (границы) функции  $\Psi$  на множестве решений в множестве планов и некоторых подмножествах  $G' \subset G$ . Тогда исходное множество решений декомпозируется на подмножества (ветвится) и на каждом подмножестве определяется нижняя оценка для  $\Psi$ . Те множества, где оценки выше, считаются «бесперспективными» для дальнейшего поиска и временно отбрасываются; поиск же продолжается на том подмножестве  $G'_i$ , где оценка ниже. Если полный перебор на  $G'_i$  все еще невозможен, производят дальнейшее ветвление и снова находят границы, причем получаемые границы функции на подмножествах не могут быть ниже, чем на подвергаемом ветвлению множестве.

Полученные границы сравнивают между собой и с границами, полученными на отброшенных ранее «бесперспективных» подмножествах, и вновь выбирают множество с наименьшей границей. Операцию повторяют пока, наконец, не будет получена задача, которую можно решить непосредственным перебором.

Для нахождения оценок иногда применяют такой прием: отбрасывают часть условий задачи, в результате чего она становится более простой и непосредственно разрешимой. Например, при минимизации линейной функции на дискретном множестве отбрасывают условие дискретности и получают, таким образом, непрерывную задачу линейного программирования. Ее решение дает нижнюю оценку поставленной задачи дискретного программирования. Такую упрощенную задачу называют граничной задачей по отношению к исходной задаче.

Для реализации общей стратегии метода ветвей и границ применительно к отдельным задачам дискретного программирования необходимо исходя из конкретных особенностей этих задач конкретизировать правила ветвления, вычисления оценок (границ) для решений и правила нахождения оптимальных решений.

Таким образом, метод ветвей и границ, который позволяет значительно сократить объем ограниченного перебора вариантов решений (особенно для прикладных задач, учитывая ряд ограничений), состоит из следующих основных этапов:

- 1) вычисление нижней границы целевой функции для решения (оценки целевой функции);
- 2) декомпозиция множества решений на подмножества (ветвление);
- 3) пересчет значений оценок для решения задачи;
- 4) установление оптимальности решения;
- 5) получение квазиоптимальных решений с заданной точностью.

Стратегия ПО-декомпозиции позволяет определить оптимальное решение ИЗС (ГЗС)  $\mathcal{P}^* \in \{P\}$  путем перебора ограниченного подмножества допустимых, или перспективных решений  $\{E\}$  образовавшегося при декомпозиции множества решений  $\{P\}$  данной ИЗС (ГЗС)  $P_0$ . Таким образом, стратегия ПО-декомпозиции решений ИЗС (или ГЗС) позволяет определить

$$(\exists! \mathcal{P}^* \in \{E\} \subset \{P\}) [\psi^*(\mathcal{P}^*) = \min \Psi(\{P\})], \quad (8.13)$$

где  $\exists!$  – символ существования какого-то (единственного) элемента.

Рассмотрим математическую формулировку стратегии. Предположим, что на основе использования некоторого характеристического свойства  $\varepsilon_1$  множество реализуемых решений ИЗС (ГЗС)  $\{P\}$  можно разбить на совокупность подмножеств решений  $\{P_{1-i}(\varepsilon_1)\}$  таким образом, чтобы

$$\{P\} = \bigcup_i \{P_{1-i}\}, \quad \{P_{1-n}\} \cap \{P_{1-m}\} = \emptyset, \forall i = \overline{1, K}, \quad n \neq m, \quad (8.14)$$

и пусть возможна дальнейшая многоуровневая декомпозиция каждого из подмножеств решений  $\{P_{1-i}\}$  с использованием других характеристических свойств  $\varepsilon_j (j = 1, N)$ . Декомпозиция каждого подмножества решений  $\{P_{ji}\}$  на каждом  $j$ -ом этапе осуществляется таким образом, что

$$\{P_{j-i}(\varepsilon_j)\} = \bigcup_i \{P_{(j+1)-1}\}, \quad \{P_{(j+1)-n}\} \cap \{P_{(j+1)-m}\} = \emptyset, \forall i = \overline{1, K_j}, \quad n \neq m. \quad (8.15)$$

Каждая серия многоуровневой декомпозиции подмножеств допустимых, или реализуемых решений осуществляется до такого уровня  $N$ , на котором образуется одноэлементное недекомпозируемое подмножество реализуемых решений  $|\{P_{N-i}\}| = 1$ , соответствующее решению некоторой ЭЗС, т. е.  $\{P_{N-i}\} \subset R$ . Чтобы сократить перебор подмножеств реализуемых решений при поиске  $\mathcal{P}^* \subset \{P\}$ , необходимо определять нижнюю границу (НГ) для

значений КЭ  $\underline{Q}_{j-i}$  для каждого из получаемых подмножеств решений  $\{P_{j-i}(\varepsilon_j)\}$ , т. е. необходимо определить

$$\underline{Q}_{j-i} = \Psi(\{\hat{P}_{j-q}\}) = \inf_{\mathcal{P}^* \in \{P\}} \Psi(\{P_{j-i}\}), \forall i = \overline{1, K_j} \quad (8.16)$$

Для реализации стратегии многоуровневой ПО-декомпозиции множества решений задач синтеза ХТС при поиске  $\mathcal{P}^* = \arg \min_{\mathcal{P}^* \in \{P\}} \psi(\{P\})$  необходимо прежде всего определить на множестве  $\{P\}$  начальное значение *верхней границы* (ВГ) для значений КЭ  $\bar{Q}_0$ , которая представляет собой значение КЭ для некоторого допустимого решения ИЗС или для решения некоторой ГЗС  $\{P_n\}$ , т. е.

$$\bar{Q}_0 = \sup \Psi(\{\bar{P}_n\}), \quad \{\bar{P}_n\} \subset \{P\}. \quad (8.17)$$

Тогда, если в процессе каждой серии многоуровневой декомпозиции множества решений задач синтеза образуется на  $j$ -ом уровне декомпозиции подмножество решений  $\{P_{j-n}\}$ , соответствующее решению некоторой подзадачи, для которой

$$\left. \begin{array}{l} \{P_{j-n}\} \neq \{\hat{P}_{j-q}\}; \\ \bar{Q}_0 = \Psi(\{\bar{P}_n\}) < \Psi(\{P_{j-n}\}), \end{array} \right\} \quad (8.18)$$

то очевидно, что подмножество решений  $\{P_{j-n}\}$  может быть исключено из рассмотрения как неоптимальное, или неперспективное подмножество решений, т. е. происходит отсечение неперспективных подмножеств решений  $\{P_{j-n}\} \notin \{E\}$ .

Если в процессе каждой серии многоуровневой декомпозиции множества решений задач синтеза на  $j$ -ом уровне декомпозиции образуется подмножество решений  $\{\hat{P}_{j-q}\}$ , соответствующее решению некоторой подзадачи, для которой

$$\left. \begin{array}{l} \Psi(\{\hat{P}_{j-q}\}) = \inf \Psi(\{P_{j-i}\}); \\ \Psi(\{\hat{P}_{j-q}\}) < \bar{Q}_0, \end{array} \right\} \quad (8.19)$$

то данное подмножество является перспективным, т. е.  $\{\hat{P}_{j-q}\} \subset \{E\}$ , и оно должно быть подвергнуто дальнейшей декомпозиции.

Таким образом, при использовании стратегии ПО-декомпозиции множества решений ИЗС (ГЗС) каждая серия многоуровневой иерархической декомпозиции подмножеств решений заканчивается либо при образовании неперспективного подмножества решений, либо при получении некоторого реализуемого решения данной ИЗС (ГЗС). Если для полученного в данной серии реализуемого решения ИЗС (ГЗС)  $\{P_N\} = \bigcup_{k=1, N} \{P_k\}$  значение КЭ или

НГ удовлетворяет соотношению

$$\Psi(\{P_N\}) = \Psi\left(\bigcup_{k=1, N} \{P_k\}\right) = \underline{Q}_N < \bar{Q}_0, \quad (8.20)$$

то значение ВГ необходимо изменить, положив, что  $\bar{Q}_n = Q_N$ , и начать новую серию многоуровневой декомпозиции множеств решений при новом значении ВГ  $\bar{Q}_n$ . Если условие (8.20) не выполняется, то новую серию многоуровневой декомпозиции проводят при неизменном значении ВГ  $\bar{Q}_0$ , а полученное решение  $\{P_N\}$  отбрасывается как неперспективное.

Алгоритмы стратегии декомпозиции множества решений ИЗС реализуются с помощью операций упорядоченного ограниченного перебора решений ИЗС, изложенных в разделе 8.8.

## 8.5. ЭВРИСТИЧЕСКО-ДЕКОМПОЗИЦИОННЫЙ ПРИНЦИП СИНТЕЗА ХТС

### 8.5.1. Основные предпосылки и общая методология

Методологической основой ЭД-принципа являются эвристическое программирование, или теория эвристических решений, теория адаптации и самоорганизаций, «диакоптика» и теория поиска оптимальных решений на основе упорядоченного перебора.

Эвристическое программирование представляет собой раздел теории искусственного интеллекта (ИИ). Искусственный интеллект – новая область науки, разрабатывающая принципы и методы автоматизированного поиска решений интеллектуальных творческих, или неформализуемых задач, а также создания диалоговых программно-аппаратных средств имитирования интеллекта, которые называются интеллектуальными системами (ИС).

К неформализуемым (невычислимым) задачам относятся, например, задачи: идентификации структур молекул по экспериментальным данным, планирования сложного органического синтеза, прогнозирования реакционной способности и физических свойств новых соединений, структурно-параметрического синтеза ресурсосберегающих ХТС. Поиск решений указанных неформализуемых задач требует прежде всего переработки разнообразных знаний, а не проведения каких-либо вычислительных процедур.

Основные направления теории искусственного интеллекта: моделирование знаний, представляющих собой смысловую информацию о сущности понятий, явлений, операций, суждений и теорий в области химии и химической технологии; моделирование отдельных видов интеллектуальной творческой деятельности человека (формулирование понятий и суждений, распознавание, рассуждение, обучение, прогнозирование, память и др.); создание предметно-ориентированных языков (ПОЯ), представляющих собой ограниченные естественные языки для некоторой проблемной области, которые обеспечивают диалог человека

с ЭВМ без применения специальных языков программирования. Эвристическое программирование позволяет в какой-то степени формализовать интуитивно-эвристический метод и оптимизировать малоэффективный метод проб и ошибок, широко используемые ЛПР при решении задач синтеза ХТС в сочетании с методом функциональной декомпозиции ИЗС. Интуитивно-эвристический метод дает возможность ЛПР, используя интуицию, выбрать некоторые удачные или наиболее рациональные варианты решения какой-либо ИЗС без полного перебора всего множества решений поставленной ИЗС.

Заметим, что интуиция, которая является базой интуитивно-эвристического метода, представляет собой способность человека решать некоторую проблему, не обосновывая принятное решение доказательством. Интуитивно-эвристический метод реализуется путем использования для решения ИЗС некоторых ЭП (см. раздел 8.1). ЛПР применяет эвристики для сокращения процесса поиска рационального семантического решения некоторой ИЗС, не гарантируя при этом его оптимальности. Существуют разнообразные наборы эвристик, используемых при синтезе неоднородных и однородных ХТС (см. разделы 9.3 и 9.5).

В настоящее время эвристическое программирование успешно применяется для решения самых различных научно-технических задач. Например, эвристические программы используются для автоматизированного синтеза ресурсосберегающих ХТС, оперативного управления сложными производственными процессами, конструирования штампов, доказательства математических теорем, оптимального распределения операций между рабочими, обслуживающими сборочный конвейер (или для балансирования сборочного конвейера), создания музыкальных произведений, игры в шахматы и шашки и др.

Для программной реализации на ЭВМ методов эвристического программирования используют специальные языки функционального программирования: РЕФАЛ, PROLOG, IPL, LISP и FLPL, имеющие древовидную иерархическую структуру.

Использование теории искусственного интеллекта, теории адаптации и самоорганизации позволяет успешно решить одну из важнейших задач создания методов автоматизированного синтеза ХТС – задачу разработки высокоэффективных методов обучения некоторых интеллектуальных систем (ИС) или разработки специальных эвристических программ выбора оптимальной стратегии поиска семантического решения поставленной ИЗС. *Обучение* представляет собой операцию выработки в некоторой ИС автоматизированного синтеза ХТС каких-либо определенных реакций на внешние воздействия в процессе поиска решения ИЗС. Операция выработки определенных реакций выполняется путем внешней корректировки некоторых параметров системы по результатам анализа процесса функционирования системы при

неоднократном поступлении внешних воздействий на систему. Операция самообучения отличается от операции обучения отсутствием внешней корректировки.

### 8.5.2. Процедура поиска семантических решений

Сущность ЭД-принципа состоит в том, что процесс решения ИЗС представляет собой итерационную процедуру с заранее заданным конечным числом попыток синтеза ХТС, в результате каждой из которых получают некоторое реализуемое семантическое решение ИЗС на основе теории элементарной декомпозиции, причем каждая ЭЗС образуется в соответствии с некоторой эвристикой, входящей в определенный набор эвристик. Для выбора ЭП из некоторого набора эвристик применяется процедура самообучения, что дает возможность вырабатывать оптимальную стратегию синтеза ХТС.

Применение ЭД-принципа синтеза ХТС для решения некоторой ИЗС базируется на следующих предпосылках:

1) рассматриваемая ИЗС может быть решена на основе ДП-принципа с использованием стратегии элементарной декомпозиции ИЗС;

2) задан определенный набор эвристик, обеспечивающий выбор альтернативных вариантов ЭЗС, образующихся при декомпозиции ИЗС согласно условию (8.5);

3) процедура синтеза ХТС представляет собой итерационную процедуру с заранее заданным конечным числом попыток синтеза. Каждая попытка синтеза позволяет получить некоторое реализуемое рациональное, или оптимальное решение ИЗС. Если при использовании заранее заданного числа попыток синтеза не будет синтезирована ХТС, превосходящая наилучшую из полученных ранее, то эта ранее полученная ХТС полагается оптимальной, и процесс синтеза прекращается;

4) поиск оптимального решения ИЗС на каждой попытке синтеза выполняется с использованием стратегии декомпозиции множества решений ИЗС (см. раздел 8.4);

5) операция выбора  $k$ -й эвристики для образования на каждом  $j$ -м этапе декомпозиции ИЗС  $i$ -й ЭЗС.

Рассмотрим подробно операции, выполняемые при поиске оптимального решения ИЗС с применением ЭД-принципа. При осуществлении декомпозиции постановки ИЗС или любой образовавшейся ПЗС используют следующие ЭП:

на каждом  $i$ -ом этапе декомпозиции ИЗС (или некоторой  $j$ -й подзадачи синтеза) на совокупность двух подзадач  $S_{i-1(j)}$  и  $S_{i-2(j)}$  декомпозиция должна проводиться таким образом, чтобы хотя бы одной из образующихся подзадач была ЭЗС, т. е. она имела тривиальное решение. Иными словами, стратегия деком-

позиции на каждом этапе должна удовлетворять условию:

$$S_{\geq i-1} = P_i \cup T_i \subset R,$$

где  $S_{\geq i-1}$  – множество, определяющее постановку ЭЗС на  $i$ -ом этапе декомпозиции;  $P_i$  – множество переменных и параметров, образовавшихся при декомпозиции множества, определяющего постановку новой задачи синтеза на  $(i-1)$ -м этапе декомпозиции ИЗС:  $P_{i-1} = P_i \cup \bar{P}_i$ ;  $P_i \cap \bar{P}_i = \emptyset$ ;  $\bar{P}_i$  – дополнение множества  $P_i$ ;  $R$  – множество переменных и параметров одного технологического аппарата;  $T_i$  – множество переменных декомпозиции.

Учитывая, что  $S_{\geq i-1} \subset R$ , на каждом  $i$ -ом этапе декомпозиции ИЗС или ПЗС можно точно рассчитать значение КЭ для полученного тривиального решения, т. е.  $E(S_{\geq i-1}) = E(P_i \cup T_i) = \Psi^*(P_i \cup T_i)$ . В этом случае выражение (8.6), которое определяет стратегию последовательной декомпозиции ИЗС, приобретает следующий вид:

$$\Psi_i^*(P_{i-1}) = \text{opt} \left\{ \text{opt} [\Psi_{i-1}^* \{(P_i \cup T_i) \subset R\} + \Psi_{i-1}^*(\bar{P}_i \cup T_i)] \right\}. \quad (8.21)$$

Таким образом, такая стратегия декомпозиции ИЗС сводится к последовательному выделению из нерешенной ИЗС или ПЗС новой подзадачи, решение которой соответствует одному технологическому аппарату ХТС. При этом значительно упрощается определение множества переменных декомпозиции  $T_i$ . Далее, для создания и уточнения начальных оценок оптимального значения КЭ еще нерешенной подзадачи  $(\bar{P}_i \cup T_i)$ , образовавшейся на  $i$ -ом этапе декомпозиции, т. е. величины  $\Psi_{i-1}^*(\bar{P}_i \cup T_i)$ , которая входит в выражение (8.21), вместо ранее рассмотренного итерационного алгоритма Д-П получения последовательности оценок  $\{\Psi_{i-1}^{(1)}, \dots, \Psi_{i-1}^{(n)}\}$  также будут использоваться некоторые эвристики. Выбирается заранее определенное множество ЭП, которые могут оказаться полезными для осуществления варианта декомпозиции ИЗС. На основе этого множества ЭП разрабатывается самобучающаяся процедура оптимального выбора эвристики, которой следует руководствоваться на каждом этапе декомпозиции ИЗС или новой ПЗС (см. раздел 8.5.3). Каждой эвристике приписывается определенная величина оценочного коэффициента. Проводя этап за этапом декомпозицию ИЗС и выбирая на каждом этапе некоторый вариант декомпозиции, генерируют технологическую схему ХТС.

Для сгенерированного семантического решения рассчитывается величина КЭ этой системы. Затем весь процесс повторяется, т. е. повторно синтезируется система. При этом используются уже другие эвристики, поскольку они выбираются случайным образом (см. раздел 8.5.3). Если технологическая схема ХТС, сгенерированная во второй раз, оказалась лучше первой по величине КЭ, то увеличиваются оценочные коэффициенты ЭП, использованных при ее генерации, в противном случае они

уменьшаются. Таким образом, реализуется процесс «самообучения» или «накопление опыта» синтеза ХТС.

Процесс синтеза повторяется многократно. Если при использовании заранее заданного числа итерационных попыток программой не будет синтезирована ХТС, превосходящая наилучшую из полученных ранее, то эта система полагается оптимальной, и процесс синтеза прекращается. При переходе к другой ИЗС в качестве исходных оценочных коэффициентов ЭП принимаются коэффициенты, полученные в процессе самообучения при решении предыдущей задачи синтеза ХТС.

Таким образом, процедура синтеза ХТС на основе ЭД-принципа включает две основные повторяемые конечное число раз стадии:

1) стадия серии попыток синтеза ХТС с использованием стратегии элементарной декомпозиции ИЗС на основе выбора определенных ЭП, входящих в некоторый набор эвристик;

2) стадия обучения выбору оптимальной стратегии элементарной декомпозиции ИЗС, т. е. стадия обучения выбору наилучших эвристик, обеспечивавших синтез вариантов ХТС при показательных попытках синтеза.

При использовании ЭД-принципа оптимальным решением ИЗС называют такое, которому соответствует такая технологическая топология синтезированной ХТС  $G^*$ , при которой

$$\forall i (\exists! G^*) [\Psi(G) \leq \Psi_i(G_i)] \quad \text{при} \quad i = \overline{1, |M|}, \quad (8.22)$$

где  $|M|$  – мощность конечного множества М попыток синтеза ХТС на основе стратегии элементарной декомпозиции с использованием определенных ЭП;  $\Psi$  – значение КЭ синтезированных ХТС.

### 8.5.3. Самообучающаяся процедура оптимального выбора эвристик

Самообучающаяся процедура оптимального выбора ЭП из некоторого заранее составленного набора ЭП базируется на использовании либо *аппарата теории вероятностей*, либо *аппарата теории нечетких множеств*.

При использовании теории вероятностей происходит случайный выбор эвристик, каждой из которых присвоен оценочный коэффициент (ОК), величина которого равна вероятности предпочтительного выбора этой эвристики на данном этапе декомпозиции ИЗС.

Значения весовых оценочных коэффициентов эвристик, используемых в той или иной серии попыток синтеза ХТС на основе ДП-принципа синтеза, изменяются по результатам предыдущих серий попыток синтеза в соответствии с алгоритмом самообучения.

Для первой серии попыток синтеза ОК всех ЭП одинаковы. Значения оценочных коэффициентов ЭП корректируются со вто-

рой серии попыток синтеза по результатам наиболее показательной попытки последней серии в сравнении с предыдущими сериями. Показательной попыткой называют либо такую «наилучшую попытку», в результате которой получен оптимальный вариант ХТС, т. е. ХТС с минимальным КЭ, если последняя серия обеспечила синтез оптимального по сравнению с предыдущими сериями попыток варианта синтезированной системы, либо такую «наихудшую попытку», в результате которой синтезирован наихудший вариант ХТС, т. е. вариант с максимальным значением КЭ, если последняя серия попыток синтеза обеспечила синтез наихудшего по сравнению с предыдущими сериями варианта синтезированной ХТС.

Значения ОК эвристик, использованных при реализации «наилучшей попытки», на последующей серии попыток синтеза увеличиваются, а значения ОК ЭП, использованных при реализации «наихудшей попытки» – уменьшаются, что и обеспечивает процедуру самообучения по выбору оптимальной стратегии синтеза ХТС.

Более подробно рассмотрим процедуру самообучения. Для любой попытки синтеза в данной серии попыток выбор ЭП из множества  $\{I\}$  на данном этапе элементарной декомпозиции ИЗС или некоторой подзадачи происходит с использованием статистического моделирования. Эта процедура статистического моделирования применительно к любому  $j$ -му уровню декомпозиции для данной попытки решения ИЗС состоит из следующих шагов. Используется генератор случайных чисел, дающий последовательность равномерно распределенных на отрезке  $(0-1)$  случайных чисел. На основе значений ОК для каждого ЭП  $v_{ij}$  ( $i = 1, q$ ) на  $j$ -ом уровне декомпозиции ИЗС определяется вероятность выбора каждой из  $q$  ЭП  $\bar{P}_{ij}$ , которая равна:

$$\bar{P}_{ij} = v_{ij} / \sum_{k=1}^q v_{kj}, \quad (8.23)$$

где  $v_{ij}$  – оценочный коэффициент  $i$ -го ЭП на  $j$ -ом уровне декомпозиции, найденный по результатам предыдущей серии попыток синтеза;  $q = |I|$  – мощность множества ЭП на  $j$ -ом уровне декомпозиции ИЗС.

Затем отрезок  $(0-1)$  разбивается на  $q$  интервалов, каждый из которых численно равен  $\bar{P}_{ij}$  в порядке возрастания  $i$  от 1 до  $q$ . Выдаваемое генератором очередное случайное число накладывается на отрезок  $(0-1)$ , и  $i$ -й интервал, на который оно попадает, определяет выбор  $i$ -ой эвристики для реализации данного этапа декомпозиции ИЗС.

В результате каждой попытки синтеза получают вариант технологической топологии ХТС, характеризующийся опреде-

ленной величиной  $\Psi = \Pi$ . Выбор для каждой последующей серии попыток синтеза оптимальной стратегии декомпозиции ИЗС реализуется путем изменения элементов матрицы значений оценочных коэффициентов ЭП  $[V_{(k)}] = [v_{ij(k)}]$ , где  $i = \overline{1,q}$ ;  $j = \overline{1,S}$ ,  $S$  – число уровней декомпозиции ИЗС;  $k$  – номер серии попыток синтеза ХТС.

Процесс обучения выбору оптимальной стратегии декомпозиции ИЗС позволяет, обрабатывая текущую информацию о результатах предыдущих серий попыток синтеза, восполнить недостаток начальной априорной информации об оптимальных значениях весовых оценочных коэффициентов, используемых ЭП, которые обеспечивают декомпозицию ИЗС. Процесс обучения осуществляется при помощи вероятностных итеративных алгоритмов, или алгоритмов обучения. Алгоритмы обучения (при соответствующих условиях) обеспечивают асимптотически достижение некоторого оптимального результата, определяемого целью обучения. В данном случае цель обучения состоит в определении оптимальных значений ОК используемых ЭП, входящих в матрицу  $[V_k]$ .

Оптимальной технологической структурой  $G^*$  синтезируемой ТС будем называть структуру, для которой имеется соотношение (8.2):

$$Z = (\exists \Psi(G^*)) : [\Psi(G^*) \leq \Psi(G_i)], \quad i = \overline{1,y},$$

где  $y = |\mathcal{Y}|$  – мощность конечного множества попыток синтеза ТС.

Для обеспечения статистической значимости процесса обучения оптимальной стратегии декомпозиции ИЗС целесообразно проводить реализацию алгоритма обучения не после каждой попытки синтеза, т. е. каждый раз после получения одного варианта ТС, а после  $N$  попыток ( $N$  – некоторое целое число), образующих одну серию попыток синтеза. Если  $\Pi_n \leq \Pi'$ , где

$\Pi_n = \min_i \Pi_i$ ,  $i = \overline{1,N}$ , то в качестве  $\bar{V}_n$  выбирают оценочные коэффициенты ЭП, которые позволили синтезировать наиболее эффективную ТС в  $N$  попытках данной серии попыток синтеза ТС. Если же  $\Pi_n > \Pi'$ , то в качестве показательной выбирается такая  $k$ -я попытка, для которой имеется

$$\Pi_k = \min_i \Pi_i, \quad i = \overline{1,N}.$$

Для реализации процедуры выбора ЭП можно использовать теорию нечетких множеств. Теория нечетких множеств – это обобщение классической теории множеств (см. раздел 2.9). Элемент  $x$  по отношению к множеству  $X$  может не только принадлежать или не принадлежать  $X$ , но может и частично ему принад-

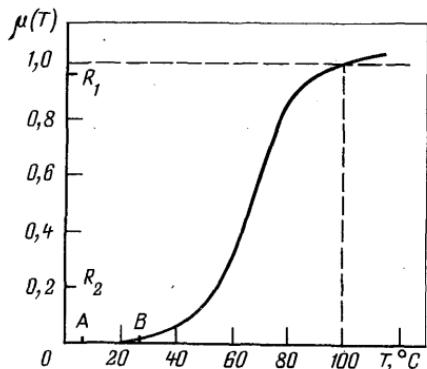
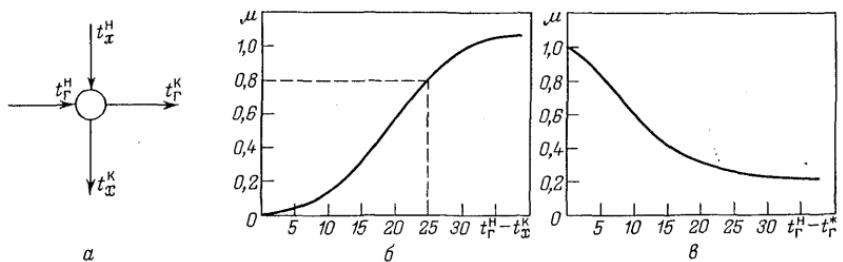


Рис. 8.16. Функция принадлежности нечеткого множества «температура воды высокая»:

$$\mu(0) = 0; \mu(20) = 0; \mu(40) = 0,05; \mu(60) = 0,2; \\ \mu(80) = 0,9; \mu(100) = 1,0$$

Рис. 8.17. Функция принадлежности для эвристик при синтезе теплообменных систем:

*a*—обозначения температур потоков; *b*, *v*—функции принадлежности



лежать. Для описания нечеткого множества  $A$  вводят для элемента  $x$  функцию принадлежности  $\mu_A(x)$ :

$$A = \{x / \mu_A(x)\}; \quad x \in X; \quad 0 \leq \mu_A(x) \leq 1. \quad (8.24)$$

В качестве примера нечеткого множества можно привести высказывание «температура воды высокая» (рис. 8.16). Это высказывание может быть правильным при температуре воды выше  $100^{\circ}\text{C}$ , неправильным при температуре воды ниже  $20^{\circ}\text{C}$  и частично правильным при температуре воды от  $20$  до  $100^{\circ}\text{C}$ .

Пересечением нечетких множеств  $A$  и  $B$  называют множество  $C = A \cap B$ :

$$\mu_C(x) = \min [\mu_A(x), \mu_B(x)]; \quad \forall x \in X. \quad (8.25)$$

Объединением нечетких множеств  $A$  и  $B$  называется множество  $C = A \cup B$ :

$$\mu_C(x) = \max [\mu_A(x), \mu_B(x)]; \quad \forall x \in X. \quad (8.26)$$

Дополнением нечеткого множества  $A$  называется множество  $\bar{A}$  с функцией принадлежности

$$\mu_{\bar{A}}(x) = 1 - \mu_A(x); \quad \forall x \in X. \quad (8.27)$$

Нечеткая импликация  $J$ : «если  $A$ , то  $B$ » имеет функцию принадлежности

$$\mu_J(x, y) = \min [\mu_A(x), \mu_B(y)]. \quad (8.28)$$

Нечеткая модель является объединением всех нечетких импликаций «если  $A_1$ , то  $B_1$ , или если  $A_2$ , то  $B_2$ » с функцией принадлежности

$$\mu_S(x, y) = \max \{\min [\mu_{A_1}(x), \mu_{B_1}(y)], \min [\mu_{A_2}(x), \mu_{B_2}(y)]\}. \quad (8.29)$$

Каждое ЭП рассматривается как нечеткое множество, имеющее определенную функциональную принадлежность.

Определение значения функции принадлежности для каждого ЭП представляет собой сложную самостоятельную задачу. Так, в основу процедуры выбора ЭП положены набор ЭП для назначения теплообмена между двумя ТП и их функция принадлежности (рис. 8.17, а):

ЭП-І. Чем больше разность температур ( $t_r^h - t_x^k$ ) в одном ТА, тем вероятнее, что такой теплообмен должен быть реализован в оптимальной ТС (рис. 8.17, б);

ЭП-ІІ. Чем больше разность температур ( $t_r^k - t_x^h$ ) в одном ТА, тем вероятнее, что такой теплообмен реализуется в оптимальной ТС. Функция принадлежности аналогична представленной на рис. 8.17, б, если заменить ( $t_r^h - t_x^k$ ) разностью ( $t_r^k - t_x^h$ );

ЭП-ІІІ. Чем меньше температуры  $t_r^h$  и  $t_x^k$  отличаются от заданных  $t_r^*$  и  $t_x^*$ , тем вероятнее, что такой теплообмен реализуется в оптимальной ТС. Функция принадлежности приведена на рис. 8.17, в.

## 8.6. ИНТЕГРАЛЬНО-ГИПОТЕТИЧЕСКИЙ ПРИНЦИП СИНТЕЗА ХТС

Методологической основой ИГ-принципа являются последовательная разработка, анализ и оптимизация некоторого множества альтернативных вариантов технологических схем, а также аппаратурного оформления элементов синтезируемой системы, которые обеспечивают желаемые цели ее функционирования. ИГ-принцип реализуется с применением следующих четырех операций:

- 1) разработка и анализ альтернативных вариантов технологической схемы ХТС;
- 2) создание гипотетической обобщенной технологической структуры (ГОТС) ХТС;
- 3) анализ ГОТС;
- 4) вычленение из ГОТС некоторой новой оптимальной технологической структуры синтезируемой ХТС в результате решения задачи оптимизации ГОТС как по значениям коэффициентов для технологических взаимосвязей между элементами, так и по параметрам элементов системы.

ГOTC синтезируемой XTC достигается функциональным объединением всех возможных альтернативных вариантов технологической топологии и аппаратурного оформления элементов данной системы.

Математическая модель ГOTC представляет собой совокупность ММ отдельных элементов (или подсистем), входящих в альтернативные варианты технологической топологии системы, и уравнений структурных взаимосвязей между этими элементами (подсистемами). Каждая технологическая связь, или структурная взаимосвязь между  $n$ -ым и  $m$ -ым элементами (или подсистемами) в ГOTC синтезируемой XTC отображается в виде ксрп  $\delta_{ni-mj}$  (см. раздел 2.1).

Математически задача вычленения из ГOTC новой технологической структуры представляет собой задачу определения значений ксрп и величины параметров элементов, входящих в исходную ГOTC, которые обеспечивают оптимальное значение некоторого КЭ  $\Psi$ :

определить

$$\Psi^* = \text{opt} \sum_{(\delta_{ni-mj}; d_n)}^N \Psi_n \{x_{n_1}, \dots, x_{NI(n)}, y_{n_1}, \dots, y_{n_J(n)}, d_n\} \quad (8.30)$$

при условии, что математическая модель ГOTC имеет следующий вид:

$$y_{ni} = f_{ni}(x_{n_1}, \dots, x_{NI(n)}, d_n); \quad (8.31)$$

$$x_{ni} = \sum_m \sum_j^{J(m)} \delta_{ni-mj} y_{mj}; \quad (8.32)$$

$$\sum_n^N \sum_i^{I(n)} \delta_{ni-mj} = 1, \quad 0 \leq \delta_{ni-mj} \leq 1 \quad (8.33)$$

при наличии ограничений на параметры элементов и параметры технологических потоков синтезируемой XTC:

$$h_{ni}(x_{n_1}, \dots, x_{nI(n)}, y_{n_1}, \dots, y_{n_J(n)}, d_n) \geq 0, \quad (8.34)$$

где  $n = \overline{1, N}$ ;  $m = \overline{1, M}$  – число элементов (подсистем);  $i = \overline{1, I}$  ( $j = \overline{1, J}$ ) – число входных (выходных) ТП элементов (подсистем), входящих в ГOTC;  $x_{ni}$  ( $y_{nj}$ ) – параметры состояния  $i$ -го входного ( $j$ -го выходного) ТП  $n$ -го элемента;  $d_n$  – оптимизирующие переменные (технологические и конструкционные параметры)  $n$ -го элемента (подсистемы).

Как указывалось выше, в результате решения задачи оптимизации ГOTC (8.30)–(8.34) определяются такие значения ксрп  $\delta_{ni-mj}$  и оптимизирующих переменных элементов XTC  $d_n$ , которые соответствуют новой технологической структуре синтезируемой XTC, обладающей оптимальной величиной КЭ.

В отличие от задач структурно-параметрического синтеза, для решения которых может использоваться ИГ-принцип, при реше-

нии задач параметрического синтеза ХТС для заданной технологической топологии синтезируемой системы определяют только лишь значения параметров элементов  $d_n$ , при которых КЭ принимает оптимальное значение.

При использовании ИГ-принципа альтернативные варианты технологической топологии синтезируемой ХТС могут представлять собой множество квазиоптимальных вариантов технологической топологии, каждый из которых получен из решения ИЗС на основе применения декомпозиционно-поискового или эвристическо-декомпозиционного принципов синтеза ХТС.

Если ММ отдельных элементов ГОТС представляют собой системы линейных уравнений, которые получены в соответствии с концепцией коэффициентов разделения (см. раздел 3.4), то для сокращения трудоемкости вычислительных процедур при решении систем уравнений ограничений (8.31)–(8.33) целесообразно использовать сигнальные графы (см. раздел 4.6).

Для решения задачи синтеза ХТС с использованием ИГ-принципа целесообразно применять двухуровневые методы оптимизации ХТС (см. раздел 7.7). При этом на первом этапе двухуровневых методов оптимизации определяются оптимальные значения коэффициентов  $\delta_{ni-mj}$ , а на втором этапе – оптимальные значения переменных  $d_n$  для данных значений коэффициентов  $\delta_{ni-mj}$ , т. е. для вполне определенной технологической топологии ХТС. Такой подход позволяет резко сократить трудоемкость вычислительных процедур и рассматривать относительно меньшее число альтернативных вариантов технологической топологии ХТС, чем при одновременном определении оптимальных значений как коэффициентов  $\delta_{ni-mj}$ , так и переменных  $d_n$ , обеспечивающих оптимальное функционирование синтезируемой ХТС.

В результате решения задачи оптимизации ГОТС для ксрп  $\delta_{ni-mj}$  могут быть определены следующие значения:

$$\delta_{ni-mj} = 0; \quad \delta_{ni-mj} \rightarrow 0; \quad \delta_{ni-mj} = 1; \quad \delta_{ni-mj} \rightarrow 1; \quad 0 < \delta_{ni-mj} < 1.$$

Если  $\delta_{ni-mj} = 0$  или  $\delta_{ni-mj} \rightarrow 0$ , то в технологическую топологию синтезируемой ХТС соответствующие потоки не входят. Если  $\delta_{ni-mj} = 1$  или  $\delta_{ni-mj} \rightarrow 1$ , то, следовательно, технологическая топология синтезируемой ХТС включает  $i$ -й и  $j$ -й ТП между  $n$ -ым и  $m$ -ым элементами (подсистемами) ХТС. Если  $0 < \delta_{ni-mj} < 1$ , то требуется дополнительное решение вопроса о возможности включения соответствующих ТП в синтезируемую ХТС.

При синтезе ХТС с использованием ИГ-принципа независимо от конкретно применяемого математического метода для решения задачи оптимизации ГОТС, как правило, исходят из допущения о том, что все переменные дискретного типа (по своей природе) рассматриваются как непрерывные. Известно, что тако-

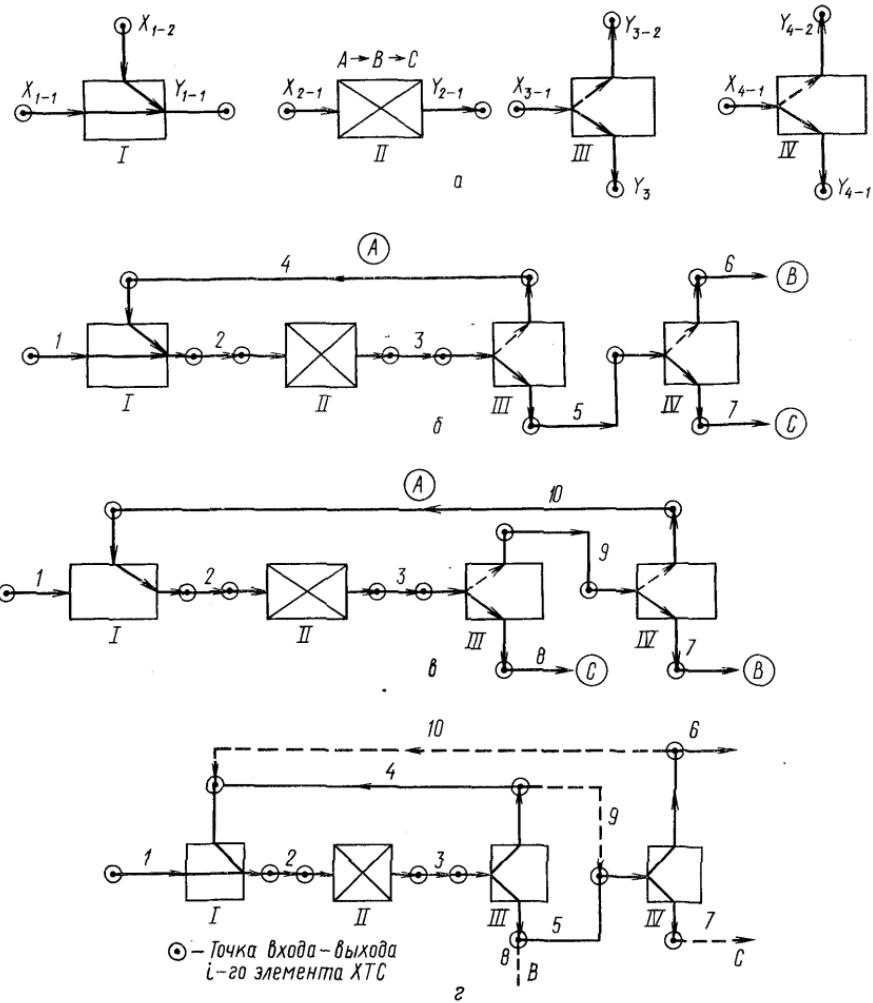


Рис. 8.18. Исходные элементы для синтезируемой ХТС (а), возможные альтернативные варианты ее технологической топологии (б и в) и гипотетическая обобщенная технологическая структура (г):

I – оператор смещения; II – оператор химического превращения; III, IV – операторы разделения; А – сырье; В, С – продукты; X, Y – параметры входных и выходных технологических потоков (1–10)

го рода допущения могут привести к определению неоптимальных решений задачи. Кроме того, при таких допущениях слишком вероятна возможность определения локальных оптимумов для КЭ, и следовательно, определения значений оптимизирующих переменных для неоптимальной технологической структуры синтезируемой ХТС.

**Пример 8.8.** Для решения задачи синтеза ХТС, обеспечивающей получение двух продуктов *B* и *C* из сырья *A* (химическая реакция  $A \rightarrow B \rightarrow C$ ), с использованием ИГ-принципа необходимо построить гипотетическую обобщенную технологическую структуру ХТС и составить ее математическую модель. Исходными элементами для синтезируемой ХТС являются: оператор смешения *I*, оператор химического превращения *II*, операторы разделения *III* и *IV* (рис. 8.18, *a*). Операторы разделения *III* и *IV* предназначены для разделения продуктов реакции (веществ *B* и *C*) и непрореагировавшего реагента *A*. Выделенный в операторах разделения реагент *A* возвращается в оператор химического превращения.

**Решение.** Составим два возможных альтернативных варианта технологической топологии ХТС (рис. 8.18, *b* и *c*). ГОТС синтезируемой ХТС, которая получается путем функционального объединения соответствующих технологических потоков (входных и выходных потоков технологических операторов), представлена на рис. 8.18, *г*.

Математическая модель ГОТС имеет следующий вид:

уравнения типа (8.31)

$$\begin{aligned} y_{1-1} &= g_1(x_{1-1}, x_{1-2}, d_1); & y_{2-1} &= g_2(x_{2-1}, d_2); & y_{3-1} &= g_{3,1}(x_{3-1}, d_3); \\ y_{3-2} &= g_{3,2}(x_{3-1}, d_3); & y_{4-1} &= g_{4,1}(x_{4-1}, d_4); & y_{4-2} &= g_{4,2}(x_{4-1}, d_4); \end{aligned}$$

уравнения типа (8.32)

$$x_{1-2} = \delta_{1-2}^{3-2} y_{3-2} + \delta_{1-2}^{4-2} y_{4-2}; \quad x_{4-1} = \delta_{4-1}^{3-1} y_{3-1} + \delta_{4-1}^{3-2} y_{3-2};$$

уравнения типа (8.33)

$$\delta_{1-2}^{3-2} + \delta_{4-1}^{3-2} = 1; \quad \delta_{1-2}^{4-2} + \delta_{(6)}^{4-2} = 1; \quad \delta_{4-1}^{3-1} + \delta_{(8)}^{3-1} = 1.$$

## 8.7. ЭВОЛЮЦИОННЫЙ ПРИНЦИП СИНТЕЗА ХТС

Методологической основой ЭВ-принципа является последовательная модификация аппаратурного оформления элементов и коррекция структуры технологических связей между элементами некоторого исходного варианта технологической топологии ХТС с использованием методов теории чувствительности (см. раздел 5.3), эвристического и математического программирования. Общая стратегия ЭВ-принципа синтеза ХТС состоит из следующих этапов:

- 1) синтез какого-либо исходного варианта технологической топологии ХТС, который представляет собой произвольное решение поставленной ИЗС;
- 2) определение в соответствии с некоторым КЭ узкого места, или наименее эффективного элемента в исходном варианте технологической топологии ХТС. Исключение выделенного узкого места, или наименее эффективного элемента из технологической топологии системы;
- 3) модификация выделенного элемента ХТС;
- 4)стыковка модифицированного элемента с немодифицированной частью исходного варианта технологической топологии системы и коррекция структуры технологических связей ХТС;
- 5) анализ полученного варианта технологической топологии синтезируемой ХТС и расчет значений КЭ и ПК, характеризующих процесс функционирования этого варианта ХТС;

6) оптимизация полученного варианта технологической топологии синтезируемой ХТС.

Указанные этапы итерационно повторяются до тех пор, пока не будет синтезирована технологическая топология системы, обеспечивающая оптимальное решение ИЗС.

Практическая реализация рассмотренной стратегии ЭВ-принципа связана с необходимостью использования трех типов эвристик, обобщающих практический опыт, интуицию и знания ЛПР. Эвристики первого типа позволяют выделить наименее эффективные элементы в исходном варианте технологической топологии системы. Эвристики второго типа необходимы для определения возможных вариантов модификации, или усовершенствования узких мест ХТС. Эвристики третьего типа обеспечиваютстыковку модифицированного элемента с немодифицированной частью исходного варианта технологической топологии системы.

Для выявления узких мест в исходных вариантах ХТС, а также для выбора вариантов их модификации наряду с эвристиками необходимо широко использовать различные методы оптимизации, а также методы теории чувствительности.

С целью выбора наилучшего варианта из нескольких возможных модификаций ХТС целесообразно применение метода многоуровневой оптимизации для получения двухсторонних и односторонних ограничений для значений КЭ измененной или модифицированной ХТС, а также использование информации о параметрах состояния системы и о значениях сопряженных переменных для ранее оптимизированной технологической топологии ХТС.

Необходимо отметить, что использование ЭВ-принципа позволяет получить в некотором смысле локальные оптимальные результаты для решения ИЗС. Это обусловлено тем обстоятельством, что результат решения ИЗС в значительной мере определяется принятыми на первом этапе основными концепциями при разработке исходного варианта технологической топологии ХТС.

В связи с этим при разработке методов синтеза ХТС для получения глобального оптимального решения ИЗС наиболее эффективно применение многоуровневой методологии синтеза.

Сущность многоуровневой методологии синтеза заключается в том, что для получения оптимального исходного варианта технологической топологии ХТС на первом уровне синтеза ХТС используют ДП-принцип, ЭД-принцип или ИГ-принцип. Затем на втором уровне синтеза ХТС к определенному оптимальному исходному варианту технологической топологии системы применяют методологию эволюционного принципа, обеспечивая тем самым получение глобального оптимального решения ИЗС.

**Пример 8.9.** Более подробно рассмотрим применение методологии ЭВ-принципа к решению ИЗС отделения деметанизации ХТС производства этилена, которое предназначено для выделения водорода и метана из смеси этилена и тяжелых углеводородов.

Технологический процесс деметанизации, который обычно проводится при высоких давлениях и больших расходах хладагентов, является самым узким местом в ХТС производства этилена. Даже незначительное усовершенствование или модификация этого процесса позволяют существенно повысить эффективность системы в целом.

Регламентированными переменными для отделения деметанизации являются количество и состав перерабатываемого сырья, массовый расход и составы потоков продуктов, температуры потоков сырья и продуктов разделения, типы используемых конструкционных материалов, стоимость тепло- и хладагентов, максимально допустимые потери этилена с верхним продуктом («хвостовыми газами»), эффективность тарелок РК.

При разработке ММ отделения, а также для расчета конструкционных и экономических параметров РК и теплообменников использованы известные соотношения. Результаты математического моделирования показывают, что стоимость РК относительно мала и является несущественной частью общей стоимости реализации процесса в целом.

**Решение.** Проанализируем узкие места в технологических схемах, цели модификации узких мест, методы осуществления и принятые модификации узких мест на различных этапах синтеза. В качестве исходного простейшего варианта технологической схемы (схема № 1) выбрана обычная РК с парциальным дефлегматором, использующим хладагент второго типа ( $-95,6^{\circ}\text{C}$ ) для получения заданного флегмового числа.

Результаты расчета затрат на реализацию такой схемы позволяют сделать следующие выводы: основные затраты связаны с потерями этилена и высокой стоимостью низкотемпературного хладагента (хладагент второго типа). Здесь следует подчеркнуть тот факт, что величина потерь этилена полностью определяется температурой сепаратора на выходе «хвостовых газов», т. е. чем ниже температура в сепараторе, тем меньше потери этилена. При модификации схемы № 1 оказалось возможным достичь более низких температур в сепараторе, что обусловлено введением дополнительного охлаждения в результате адиабатического расширения «хвостовых газов» и введения дополнительного рекуперационного теплообменника. Достижаемый эффект «самоохлаждения», кроме того, позволяет несколько снизить расход хладагента для дефлегматора. Схема № 2, полученная в результате модификации исходного простейшего варианта, представлена на рис. 8.19.

В этом случае происходит некоторое снижение температуры в сепараторе на выходе верхнего продукта, но потери этилена, как и расход низкотемпературного хладагента, все еще составляют основные статьи расходов при реализации процесса. Снижение расхода хладагента возможно лишь при снижении количества орошения, которое позволяет уменьшить и температуру в сепараторе, а значит, и потери этилена. Понижение температуры в сепараторе является следствием того, что поток «хвостовых газов» относительно постоянен, откуда вытекает и постоянство получаемого с его помощью холода. Следовательно, при снижении количества флегмы меньшая часть холода затрачивается на образование потока орошения.

Одним из методов снижения количества флегмы является охлаждение потока питания. В случае разделения бинарных смесей, как известно, при охлаждении потока питания уменьшается наклон рабочей линии для исчерпывающей секции колонны в сторону минимального орошения, что позволяет уменьшить верхний поток флегмы.

Указанный анализ узкого места в схеме № 2 приводит к разработке схемы № 3, в которой поток питания перед подачей в РК предварительно охлаждается хладагентом первого типа ( $-67,8^{\circ}\text{C}$ ).

При этом в схеме № 3 достигается значительный экономический эффект: поток флегмы уменьшается почти в два раза, общая стоимость процессов

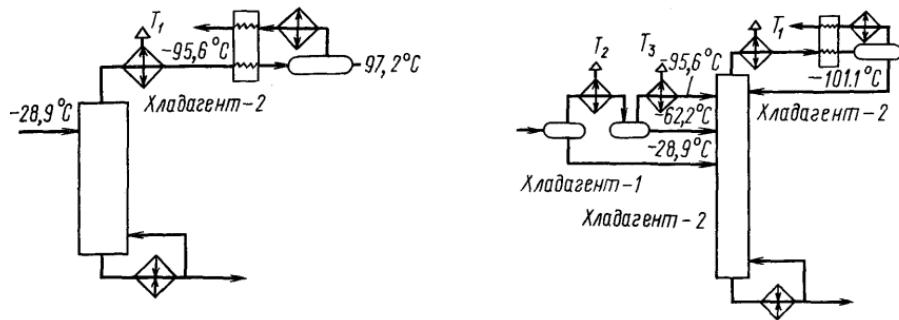


Рис. 8.19. Этапы эволюционного синтеза технологической схемы отделения деметанизации ХТС производства этилена (схема 2: ввод рекуперативного самоохлаждения «хвостовых газов»)

Рис. 8.20. Ввод сепаратора и дополнительного холодильника для потока питания (схема № 5 – организация трех потоков питания ректификационной колонны;  $T_1$  –  $T_3$  – холодильники)

охлаждения снижается, достигается дополнительное охлаждение сепаратора, которое позволяет снизить потери этилена.

Для схемы № 3 наименее экономичен холодильник на входе потока питания в колонну, так как до одной трети его производительности затрачивается на охлаждение жидкой части питания. В этом случае наиболее логичным шагом эволюционного синтеза является выделение паровой фазы питания для того, чтобы охлаждать только данный паровой поток. При этом возникают два потока питания, которые должны подаваться в колонну в оптимальных точках. Реализация такой модификации схемы (схема № 4) позволяет значительно снизить затраты, связанные с охлаждением потока питания. Необходимо отметить, что в этом случае несколько возрастает количество флегмы, что, как известно, приводит к увеличению потерь этилена. Тем не менее, достигается экономия, обусловленная разделением потока питания, весьма оптимистична.

Следующим этапом синтеза оптимальной схемы отделения является дальнейшее снижение потерь этилена. Для этого необходимо увеличить мощность холодильника на линии питания, что приводит к схеме № 5 (рис. 8.20). Для схемы № 5 характерно уменьшение в 4 раза потока флегмы, что позволяет снизить потери этилена в результате понижения температуры в сепараторе верхнего продукта. Для дальнейшего снижения потерь этилена на следующем этапе синтеза в схему № 5 вводится промежуточное орошение колонны через холодильник  $T_3$ , которое, в частности, позволяет исключить из схемы верхний холодильник  $T_1$ .

## 8.8 ОПЕРАЦИИ УПОРЯДОЧЕННОГО ПОИСКА РЕШЕНИЙ ИСХОДНЫХ ЗАДАЧ СИНТЕЗА ХТС

Операции генерации и выбора решений ИЗС ресурсосберегающих ХТС, которые осуществляются в соответствии со стратегиями ДП-, ЭД- и ЭВ-принципа, могут быть наглядно отображены с использованием двух классов топологических моделей: деревьев (в общем случае, графов) декомпозиции ИЗС и деревьев (графов) вариантов решений ИЗС. Графы декомпозиции ИЗС (графы

вариантов решений ИЗС) могут быть получены из соответствующих деревьев декомпозиции ИЗС (деревьев вариантов решений ИЗС) объединением (склеиванием) одноименных вершин этих деревьев.

Выделяют две группы деревьев декомпозиции ИЗС – деревья элементарной декомпозиции (ДЭД) ИЗС и деревья произвольной декомпозиции (ДПД) ИЗС, которые отображают различные стратегии ДП-принципа синтеза ХТС (см. раздел 8.4).

Изложим методику построения деревьев декомпозиции ИЗС. ДЭД и ДПД представляют собой «И/ИЛИ-деревья» (более строго – прадеревья с корнями). Вершина-корень отображает постановку ИЗС. Промежуточные вершины отображают постановку подзадач, образованных на некотором уровне декомпозиции ИЗС (см. раздел 8.4). Выделим два множества промежуточных вершин – ДЭД и ДПД – «вершина типа ИЛИ» («вершины-ИЛИ») и «вершины типа И» («вершины-И»).

«Вершины-ИЛИ» отображают постановку тех альтернативных задач, к которым может быть приведена ИЗС (некоторая подзадача). Множество решений всех альтернативных задач совпадают со множеством решений ИЗС (некоторой подзадачи). «Вершины-И» отображают варианты элементарной, или произвольной декомпозиции ИЗС (некоторой подзадачи синтеза), приводящей к образованию не менее двух подзадач синтеза, совместное решение которых дает решение ИЗС (некоторой подзадачи). Для «И/ИЛИ-деревьев» все вершины-потомки некоторой вершины-предка, отображающей постановку задачи предыдущего уровня декомпозиции ИЗС, могут быть только вершинами одного типа.

Висячие вершины ДЭД и ДПД – отображают постановку ЭЗС или постановку нереализуемых задач синтеза. Висячей вершине ДЭД или ДПД на данном уровне декомпозиции ИЗС присваивается тот же тип, что и тип промежуточных вершин этого уровня декомпозиции. Вершины, отображающие постановку нереализуемых задач, называют «неразрешимыми вершинами». Вершины, которые отображают постановку задач синтеза, имеющих решение, называют «разрешимыми вершинами».

Ветви, выходящие из «вершины-И», отображают множество переменных декомпозиции  $T$  и соответствуют «ключевым операторам», обеспечивающим процедуру декомпозиции задач синтеза. Ветви, выходящие из «вершин-И», объединяют между собой двойной чертой. Ветви, которые выходят из «вершин-ИЛИ», отображают операцию сведения некоторой задачи синтеза к множеству альтернативных задач.

Процесс поиска решения ИЗС на ДЭД или ДПД – это процесс генерации, или построения некоторого решающего подграфа. Решающий подграф отображает совокупность реализуемых подзадач, полученных при декомпозиции ИЗС, совместное решение

которых образует реализуемое решение ИЗС. Решающий подграф обязательно включает вершину-корень. Все вершины решающего подграфа являются разрешимыми вершинами.

Методика построения дерева граничных задач синтеза (ДГЗС) определяется математической формулировкой стратегии редуктивно-граничной декомпозиции множества решений ИЗС, представленной соотношениями (8.10)–(8.12). ДГЗС – это прадерево с корнем. Вершина-корень ДГЗС отображает постановку ГЗС, к которым может быть приведена при выполнении определенных граничных условий ИЗС или какая-либо ГЗС предыдущего уровня многоуровневой редуктивно-граничной декомпозиции решений ИЗС.

Висячая вершина ДГЗС отображает либо ГЗС, являющуюся некоторой ПЗС, множество решений которой можно определить путем простого перебора, либо ГЗС, представляющую собой нереализуемую, или неперспективную задачу синтеза, т. е. такую задачу, сводить которую к ГЗС меньшей размерности не имеет смысла, так как эта процедура не приведет к определению оптимального решения ИЗС.

Ветвь ДГЗС отображает множество специальных ограничений, при выполнении которых ИЗС или некоторую ГЗС предыдущего уровня редуктивно-граничной декомпозиции возможно свести к ГЗС нижнего уровня. Множество специальных ограничений, как правило, может представлять собой необходимость применения для решения задачи синтеза некоторого специального технологического оператора. Иными словами, ветвь ДГЗС может отображать некоторый специальный технологический оператор, применение которого сводит ГЗС предыдущего уровня к ГЗС последующего уровня декомпозиции с меньшей размерностью множества решений.

Цепь ДГЗС отображает набор ГЗС, множество решений каждой из которых дает набор возможных решений ИЗС. Множество решений ГЗС, отображаемой на ДГЗС некоторой вершиной-предком, представляет собой совокупность множеств решений ГЗС, отображаемых вершинами-потомками этой вершины-предка.

Существуют различные методики построения дерева вариантов решений (ДВР), которые устанавливают соответствие между основными понятиями теории пространства состояний применительно к проблеме синтеза ХТС – состояние, оператор, начальное и конечное состояние – и элементами ДВР (вершинами и дугами). Одна из наиболее общих методик построения ДВР подробно рассматривается ниже. Другая возможная методика построения ДВР для решения задачи синтеза оптимальных систем ректификации зеотропных смесей приведена в разделе 9.5. Между ДВР, которые построены по различным методикам можно установить вполне определенное соответствие.

Рассмотрим общую методику построения деревьев вариантов решений (ДВР) ИЗС.

Как указывалось выше (см. раздел 8.4), ДВР топологически отображает математическую постановку ИЗС как задачи теории пространства состояний и процесс упорядоченного ограниченного поиска оптимального решения ИЗС, реализация которого осуществляется в соответствии с соотношениями (8.17) – (8.19).

Состояние или промежуточное состояние ХТС определяется совокупностью КЭ и параметров выходных технологических потоков ее некоторой подсистемы, представляющей собой решение некоторой подзадачи на данном этапе элементарной декомпозиции ИЗС.

Оператор преобразует одно состояние ХТС или подсистемы в другое состояние и соответствует некоторому технологическому оператору ХТС, т. е. одной единице оборудования или одному аппарату, в котором протекает некоторый ХТП. Начальное состояние ХТС определяется совокупностью параметров входных ТП, поступающих на преобразование или переработку в ХТС. Конечное состояние ХТС определяется как совокупность параметров выходных технологических потоков ХТС, так и величиной КЭ, характеризующих процесс функционирования синтезируемой системы. Состояние-веха – это такое состояние, которое обладает тем свойством, что оно обязательно принадлежит решению ИЗС.

Вершина-корень прадерева, которым является ДВР, отображает начальное состояние ХТС. Висячая вершина ДВР отображает либо конечное состояние ХТС, соответствующее некоторому произвольному или оптимальному решению ИЗС, либо промежуточное состояние ХТС, которое соответствует подмножеству неперспективных решений ИЗС, не подлежащих дальнейшей декомпозиции и рассмотрению (см. раздел 8.4).

Промежуточная вершина ДВР отображает некоторое промежуточное состояние ХТС, определяемое не только совокупностью КЭ и параметров промежуточных технологических потоков подсистем, но и величиной «коэффициентов различия». «Коэффициенты различия» показывают степень различия между текущими значениями параметров промежуточных технологических потоков, полученными на данном этапе элементарной декомпозиции ИЗС, и требуемыми значениями параметров выходных технологических потоков синтезируемой химико-технологической системы.

Ветвь ДВР отображает некоторый оператор пространства состояний, т. е. информационный оператор, или модуль расчета некоторого технологического оператора ХТС, который изменяет, или преобразует множество состояний ХТС. Конкретный вид информационных операторов, или модулей может быть выбран в соответствии со значениями коэффициентов различия вершин-

предков таким образом, чтобы в вершинах-потомках значения коэффициентов различия приближались к единице.

Простая цепь ДВР, которая исходит из вершины-корня прадерева, отображает либо технологическую топологию синтезируемой ХТС в целом, либо ее некоторой подсистемы или некоторого фрагмента ХТС.

Необходимо отметить, что ДВР представляет собой вырожденный, или тривиальный случай ДПД, так как каждая ветвь ДВР, выходящая из вершины предыдущего уровня, отображает операцию применения некоторого технологического оператора к некоторому предыдущему состоянию, сводящую задачу синтеза предыдущего уровня декомпозиции ИЗС к более простой подзадаче, решение которой определяют, используя стратегию многоуровневой элементарной декомпозиции.

В соответствии с методикой представления информации о деревьях будем выделять два вида деревьев вариантов решения ИЗС (или деревьев декомпозиции ИЗС) – эксплицитные и имплицитные деревья. Информация о каком-либо виде дерева, отображающем некоторый принцип синтеза ХТС, определяется математической постановкой ИЗС и методологией используемого принципа синтеза.

Эксплицитное дерево – это такое дерево, информация о котором подробно, полностью, или в явном виде представлена либо графически, либо матрично, т.е. для эксплицитного дерева существует подробное описание всех его вершин и ветвей.

Имплицитное дерево – это такое дерево, информация о котором задается неявно, или неподробно в виде указания о вершине-корне и операций, или правил для получения всех ветвей и вершин дерева. С помощью указанных правил, или операций получения ветвей и вершин имплицитного дерева можно всегда сформировать некоторое желаемое усеченное эксплицитное дерево, являющееся подграфом имплицитного дерева. Процедуру, превращающую имплицитное дерево в эксплицитное, называют порождающей, или генерирующей процедурой.

Различают несколько видов порождающих, или генерирующих процедур, которые также представляют собой процедуры упорядоченного ограниченного поиска оптимального решения ИЗС с помощью ДВР. Порождающие процедуры позволяют отыскивать оптимальное решение ИЗС не на «полном эксплицитном дереве» данной ИЗС, что соответствует алгоритму поиска решений путем полного перебора, а на усеченном эксплицитном дереве, построенном для заданного имплицитного ДВР. Поиск оптимального решения на усеченном эксплицитном дереве-подграфе имплицитного дерева соответствует алгоритму упорядоченного ограниченного перебора, значительно сокращающего размерность пространства поиска оптимального решения ИЗС.

Чтобы получить комплексное представление о стратегии решения ИЗС с применением ДП- и ЭД-принципов синтеза ХТС предлагается строить «комбинированные деревья стратегии решения ИЗС». Комбинированные деревья стратегии решения ИЗС получают, совмещая деревья декомпозиции ИЗС и деревья декомпозиции решений ИЗС, построенных для данной задачи синтеза ХТС.

Покажем применение предложенной методики построения ДГЗС, ДЭД и ДПД для топологического отображения стратегии решения ИЗС некоторой ХТС производства четырехкомпонентной смеси ( $A, B, C, D$ ) при наличии запасов сырья трех типов – двухкомпонентная смесь ( $A, B$ ) и однокомпонентное сырье двух типов ( $C$ ) и ( $D$ ). При синтезе ХТС допускается применение технологических операторов смешения не более чем с двумя входами и одним выходом. Для упрощения задачи массовые расходы ТП и концентрации химических компонентов в смесях не будем учитывать.

Для решения данной ИЗС используют ДП-принцип синтеза ХТС (см. раздел 8.4). Стратегия решения ИЗС на основе стратегий произвольной и элементарной декомпозиции ИЗС и стратегии редуктивно-граничной декомпозиции множества решений ИЗС отображается комбинированным «И/ИЛИ-деревом», имеющим четыре уровня иерархии слоев вершин (рис. 8.21). Комбинированное «И/ИЛИ-дерево» представляет собой совмещение ДГЗС и деревьев декомпозиции ИЗС. I и II уровни иерархии слоев вершин этого дерева образуют ДГЗС-подграф комбинированного «И/ИЛИ-дерева» задачи синтеза ХТС производства четырехкомпонентной смеси ( $A, B, C, D$ ).

При построении комбинированного «И/ИЛИ-дерева» использованы следующие условные обозначения:  $P$  – вершина-корень, отображающая ИЗС;  $\tilde{P}_I, \tilde{P}_{II}$  и  $\tilde{P}_{III}$  – промежуточные «вершины-ИЛИ», отображающие постановку ГЗС, к

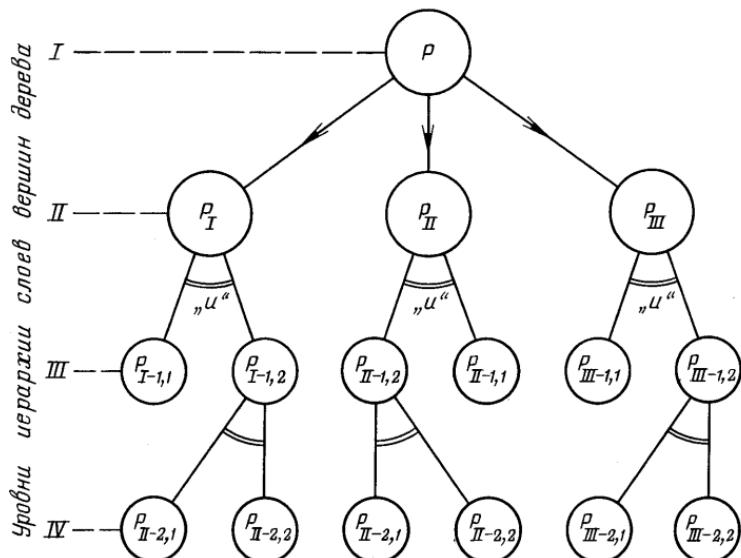


Рис. 8.21. Комбинированное «И/ИЛИ-дерево», отображающее применение декомпозиционно-поискового принципа синтеза ХТС для решения ИЗС некоторой ХТС, обеспечивающей производство смеси ( $A, B, C, D$ ) из трех видов сырья ( $A, B$ ), ( $C$ ) и ( $D$ )

которым может быть приведена ИЗС;  $P_{I(I,II)-1,2}$  — промежуточная «вершина-И», отображающая вторую подзадачу I (II или III) ГЗС, образованную на первом уровне декомпозиции ГЗС. Формулировка ГЗС имеет следующий вид: получить четырехкомпонентную смесь  $(A, B, C, D)$  при наличии запасов сырья трех видов  $(A, B)$ ,  $(C)$  и  $(D)$  путем смещения двух типов потоков:  $\{\tilde{P}_1\} = (A, B)$ ,  $(C, D)$ ;  $\{\tilde{P}_{II}\} = (D)$ ,  $(A, B, C)$ ;  $\{\tilde{P}_{III}\} = (C), (A, B, D)$ .

Висячие вершины дерева отображают исходные источники сырья:

$$P_{I-1,1} \rightarrow P_{II-2,1} \rightarrow P_{III-2,2} \rightarrow (A, B); \quad P_{I-2,1} \rightarrow P_{II-2,2} \rightarrow P_{III-1,1} \rightarrow (C); \\ P_{I-2,2} \rightarrow P_{II-1,1} \rightarrow P_{III-2,1} \rightarrow (D).$$

Решение каждой подзадачи ГЗС, отображаемой промежуточной вершиной дерева, представляет собой некоторый технологический оператор смещения, обеспечивающий получение на выходе некоторой определенной смеси компонентов:  $\{P_1\} = (A, B), (C, D)$ ;  $\{P_{II}\} = (D), (A, B, C)$ ;  $\{P_{III}\} = (C), (A, B, D)$ ;  $\{P_{I-1,2}\} = (C, D)$ ;  $\{P_{III-1,2}\} = (A, B, D)$ .

Операторные схемы ХТС, соответствующие альтернативным решениям указанной ИЗС, представлены на рис. 8.22. Операторная схема на рис. 8.22, *а* соответствует решающему подграфу  $G_1$  с вершинами  $\tilde{P}_1$ ,  $P_{I-1,1}$ ,  $P_{I-2,1}$  и  $P_{I-2,2}$ , т. е. подграфу  $G_1 = (\tilde{P}_1, P_1, P_{I-1,1}, P_{I-1,2}, P_{I-2,1}, P_{I-2,2})$ . Операторные схемы на рис. 8.21, *б* и 8.21, *в* соответствуют решающим подграфам  $G_2 = (\tilde{P}_{II}, P_{II}, P_{II-1,1}, P_{II-2,1}, P_{II-2,2})$  и  $G_3 = (\tilde{P}_{III}, P_{III}, P_{III-1,1}, P_{III-1,2}, P_{III-2,1}, P_{III-2,2})$ .

На рис. 8.23 представлен комбинированный «И/ИЛИ-граф» стратегии решения данной ИЗС с применением ДП-принципа синтеза ХТС, полученный объединением одноименных вершин комбинированного «И/ИЛИ-дерева».

Для поиска оптимальных решений ИЗС можно использовать три операции упорядоченного полного перебора вершин ДВР: «ветвление в ширину», «ветвление в глубину», «смешанное ветвление». Каждая из указанных операций устанавливает определенный порядок выбора среди всех вершин ДВР активных вершин ДВР. Каждому  $i$ -ому данному или текущему этапу декомпозиции множества решений ИЗС соответствует некоторое множество вершин ДВР, принадлежащих одному данному или текущему уровню иерархии слоев вершин, и одна активная вершина, которая может принадлежать либо данному и предыдущему уровням иерархии слоев вершин ДВР, либо данному (либо предыдущему) уровню иерархии слоев вершин.

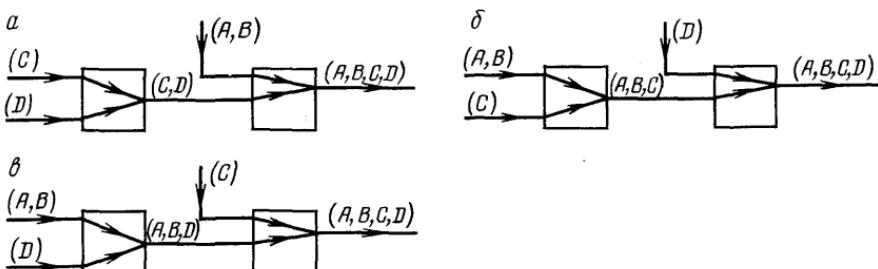


Рис. 8.22. Операторные схемы альтернативных вариантов синтезируемой ХТС производства четырехкомпонентной смеси  $(A, B, C, D)$

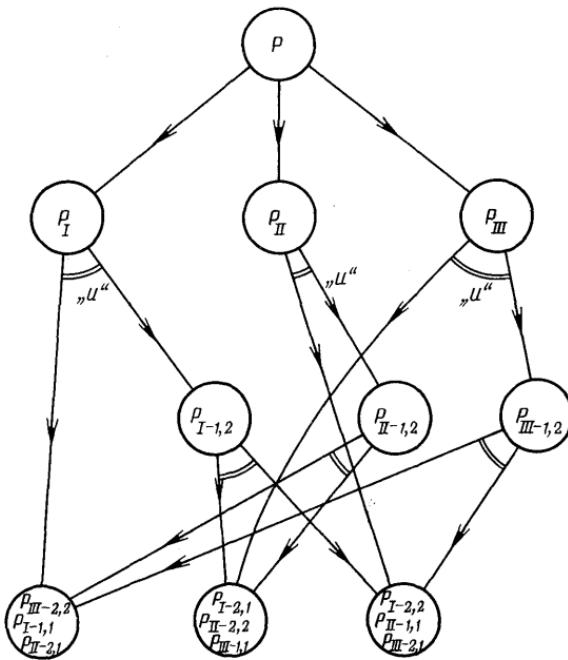


Рис. 8.23. Комбинированный «И/ИЛИ-граф» стратегии решения ИЗС на основе декомпозиционно-поискового принципа синтеза ХТС

Активная вершина ДВР – это такая вершина, для которой на данном этапе декомпозиции образуются все ее вершины-потомки на следующем уровне иерархии слоев вершин ДВР. Процесс образования, или порождения вершин-потомков для активной вершины-предка также называют процессом декомпозиции, или раскрытия активной вершины. Процесс раскрытия активной вершины соответствует либо операции декомпозиции некоторой ГЗС на подзадачи, либо операции декомпозиции некоторого множества решений ИЗС на совокупность подмножеств решений. Процесс декомпозиции активной вершины ДВР отображает операцию применения некоторого оператора к состоянию, которое соответствует данной активной вершине.

Рассмотрим сущность различных операций упорядоченного полного перебора вершин ДВР, устанавливающих порядок выбора активных вершин ДВР.

Ветвление в ширину – в качестве активной вершины выбирается вершина среди всех вершин данного и предыдущих уровней ДВР. После этого из выбранной активной вершины производится ветвление, при котором просматриваются все возможные ветви, выходящие из этой вершины. В результате этого получают сразу группу вершин следующего уровня ДВР. В дальнейшем выбор

активной вершины происходит среди всего множества данного и предыдущего уровней ДВР.

Ветвление в глубину – в качестве активной вершины выбирается одна из висячих вершин последнего образовавшегося уровня вершин ДВР, соответствующего уровню декомпозиции исходной задачи. После завершения всей цепи ДВР, отображающей некоторое решение ИЗС, или просмотра всех висячих вершин раскрываемого уровня ДВР выбор активной вершины происходит на предыдущем уровне.

Просмотр вершин на ДВР происходит либо справа налево, либо слева направо среди всех цепей ДВР.

Смешанное ветвление – вначале происходит просмотр в глубину, т. е. для раскрытия выбирается активная вершина из вершин данного (последнего образовавшегося) уровня вершин ДВР. После просмотра цепи ДВР, отображающей некоторое завершенное решение, выбор активной вершины происходит как при ветвлении в ширину, т. е. среди висячих вершин предыдущих уровней ДВР.

При любой операции упорядоченного полного перебора процесс раскрытия активных вершин ДВР заканчивается, когда не остается ни одной висячей вершины, из которой можно вести ветвление.

Сравним эффективность операций ветвления в глубину и в ширину. Ветвление в ширину требует просмотра наименьшего числа промежуточных вершин (наименьшего числа ветвлений), но требует запоминания большого числа активных вершин. Ветвление в глубину требует просмотра большого числа промежуточных вершин (числа ветвлений), но не требует запоминания большого числа активных вершин.

Необходимо особо подчеркнуть, что метод динамического программирования соответствует операции упорядоченного полного перебора на ДВР путем ветвления в ширину.

Операции упорядоченного ограниченного перебора множества решений ИЗС реализуют стратегию перспективно-отсекающей декомпозиции ДП-принципа, которая базируется на методе ветвей и границ (см. раздел 8.4).

Выделяют три операции упорядоченного ограниченного перебора множества решений ИЗС: «волнового ветвления», «лучевого ветвления» и «луче-волнового ветвления», которые представляют собой операции генерации, или создания множества решений.

Волновое ветвление – это совокупность операции ветвления в ширину на ДВР и процедуры перспективно-отсекающей декомпозиции ИЗС. Лучевое ветвление – это совокупность операции ветвления в глубину на ДВР и процедуры перспективно-отсекающей декомпозиции. Луче-волновое ветвление – это совокупность операции смешанного ветвления и процедуры перспективно-отсекающей декомпозиции ИЗС.

Каждая из указанных операций устанавливает определенный порядок выбора среди всех висячих вершин ДВР активных вершин ДВР, отображающих такие решения ГЗС и ИЗС, которые принадлежат только подмножеству допустимых, или перспективных решений ГЗС или ИЗС  $\{E\}$ , образующемуся при многоуровневой перспективно-отсекающей декомпозиции множества решений ГЗС  $\{\tilde{P}\}$  или ИЗС  $\{P\}$  (см. раздел 8.4).

При упорядоченном ограниченном переборе вершин ДВР критерием выбора активной вершины, или так называемой «функцией ветвления»  $f$  является в случае поиска минимума КЭ либо значение НГ (8.16), либо значение НГ с упреждением на  $m$  шагов вперед, либо значение некоторой «эвристической оценочной функции».

В качестве активной вершины ДВР на каждом  $i$ -ом уровне декомпозиции ИЗС может быть выбрана только такая вершина  $n_k$ , для которой величина ее функции ветвления, или критерия выбора не превосходит значения ВГ.

Задача определения значения величины НГ для любой вершины ДВР представляет самостоятельный интерес, и ее решение зависит как от содержательной, так и от математической постановки рассматриваемой ИЗС. При решении задач синтеза ХТС в качестве НГ используют значение некоторого аддитивно-сепарабельного КЭ, который соответствует подсистеме (фрагменту) синтезируемой ХТС, представляющей собой решение некоторой подзадачи на данном этапе декомпозиции ИЗС (см. раздел 8.4), которое отображается висячей вершиной ДВР. Указанный метод расчета НГ соответствует «методу равных цен» для определения «стоимости пути» на ДВР. При использовании «метода равных цен» критерий выбора активной вершины  $f$  на  $i$ -ом слое вершин ДВР имеет следующий вид, который соответствует соотношениям (8.2), (8.3) и (8.20):

$$f(n_i) = \Psi(n_i) = \sum_j^i \Psi_j(n_j), \quad (8.35)$$

где  $\Psi_j(n_j)$  – НГ, соответствующая КЭ подсистемы (фрагмента) синтезируемой ХТС, представляющей собой решение подзадачи синтеза на  $j$ -ом этапе декомпозиции ИЗС.

Критерий выбора активной вершины на  $i$ -ом слое вершины ДВР в виде значения НГ с упреждением на  $m$  шагов вперед  $\tilde{f}$  имеет следующее выражение:

$$\tilde{f}(n_i) = \Psi(n_{i+m}) = \sum_j^{i+m} \Psi_j(n_j), \quad (8.36)$$

где  $\Psi(n_{i+m})$  – НГ, соответствующая КЭ подсистемы (фрагмента) синтезируемой ХТС, представляющей собой решение подзадачи синтеза, образованной в результате применения к состоянию  $n_i$ , отображаемому на ДВР вершиной  $n_i$ , оператора  $\Gamma_m(n_i)$ , последний вырабатывает все состояния, расположенные от состояния  $n_i$  на глубину от 1 до  $m$ .

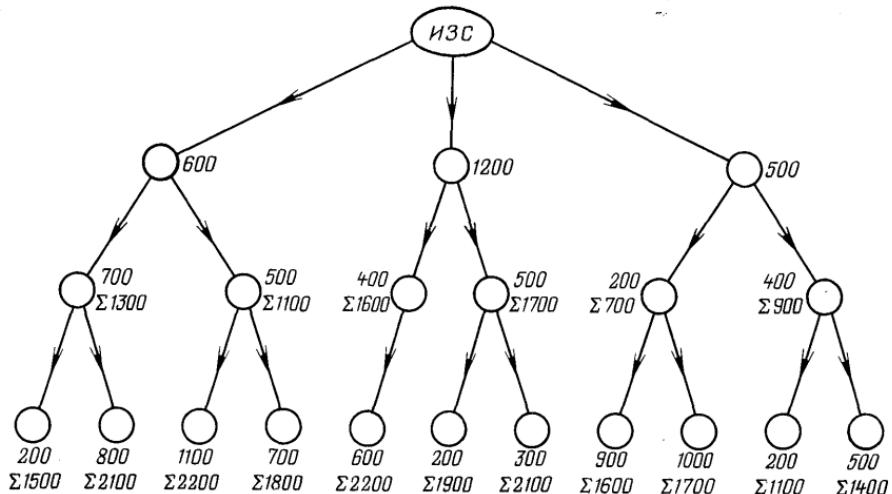


Рис. 8.24. Полное эксплицитное дерево вариантов решения задачи синтеза некоторой ХТС

Применение оператора  $\Gamma_m(n_i)$  соответствует построению подграфа ДВР в виде эксплицитного прадерева с корнем в вершине  $n_i$ .

Критерий выбора активной вершины ДВР в виде эвристической оценочной функции  $\tilde{f}^*$  равен:

$$\tilde{f}^*(n_i) = \Psi(n_i) + h(n_i), \quad (8.37)$$

где  $\Psi(n_i)$  – КЭ, определяемый по выражению (8.35);  $h(n_i)$  – эвристическая оценка КЭ для еще несинтезированной подсистемы, или фрагмента ХТС, которая определяется спецификой постановки решаемого класса задач синтеза ХТС.

Критерий окончания поиска оптимального решения на ДВР: процесс раскрытия активных вершин ДВР заканчивается, когда не остается ни одной висячей вершины, из которой можно вести ветвление, т. е. не остается вершины, значение оценки НГ для которой превышает известное на данном этапе значение оценки ВГ. Решение, соответствующее этой оценке ВГ, является оптимальным.

Пример 8.10. Для полного эксплицитного ДВР (рис. 8.24), которое отображает все варианты решения ИЗС, необходимо построить усеченные эксплицитные ДВР, соответствующие операциям упорядоченного ограниченного перебора: волнового и лучевого ветвления. Сравнить эффективность указанных операций по числу генерированных вершин для ДВР.

На полном и усеченных эксплицитных ДВР каждой  $i$ -й вершине соответствует значение некоторого КЭ:  $\Psi_i$  – оценки НГ  $\bar{Q}_i$ .

Оптимальное решение ИЗС соответствует минимуму КЭ:  $\Psi^* = \min_i \sum \Psi_i$ .

Для исходной ВГ принято значение  $\bar{Q}_0 \Psi_0 = 3000$  усл. ед.

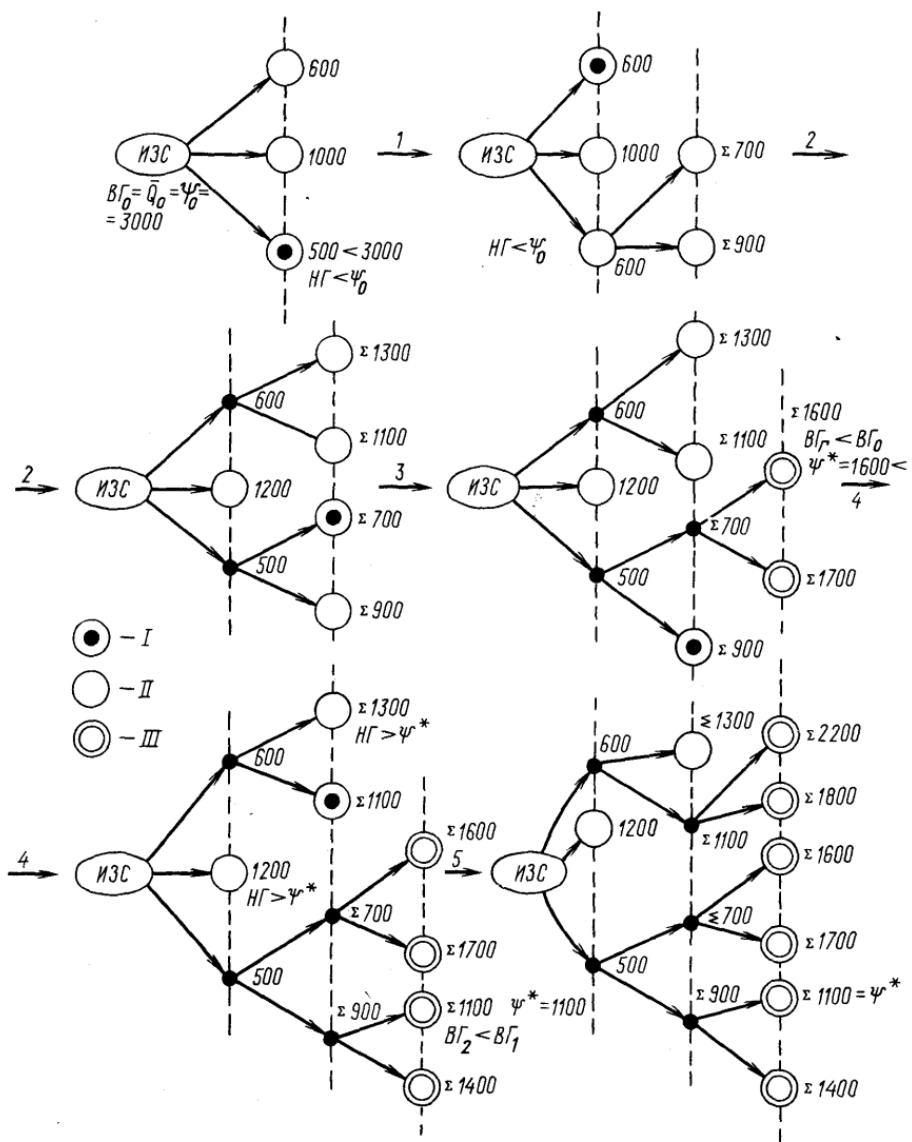


Рис. 8.25. Последовательность генерации эксплицитного ДВР для стратегии «волнового ветвления»:  
I – активная вершина; II – висячая вершина; III – висячая вершина, соответствующая завершенному решению

**Решение.** Последовательность операций генерации усеченного ДВР (т. е. раскрытия активных вершин ДВР) с использованием волнового ветвления представлена на рис. 8.25. Общее число сгенерированных вершин для ДВР (раскрытых активных вершин) при поиске оптимального решения ИЗС, которое

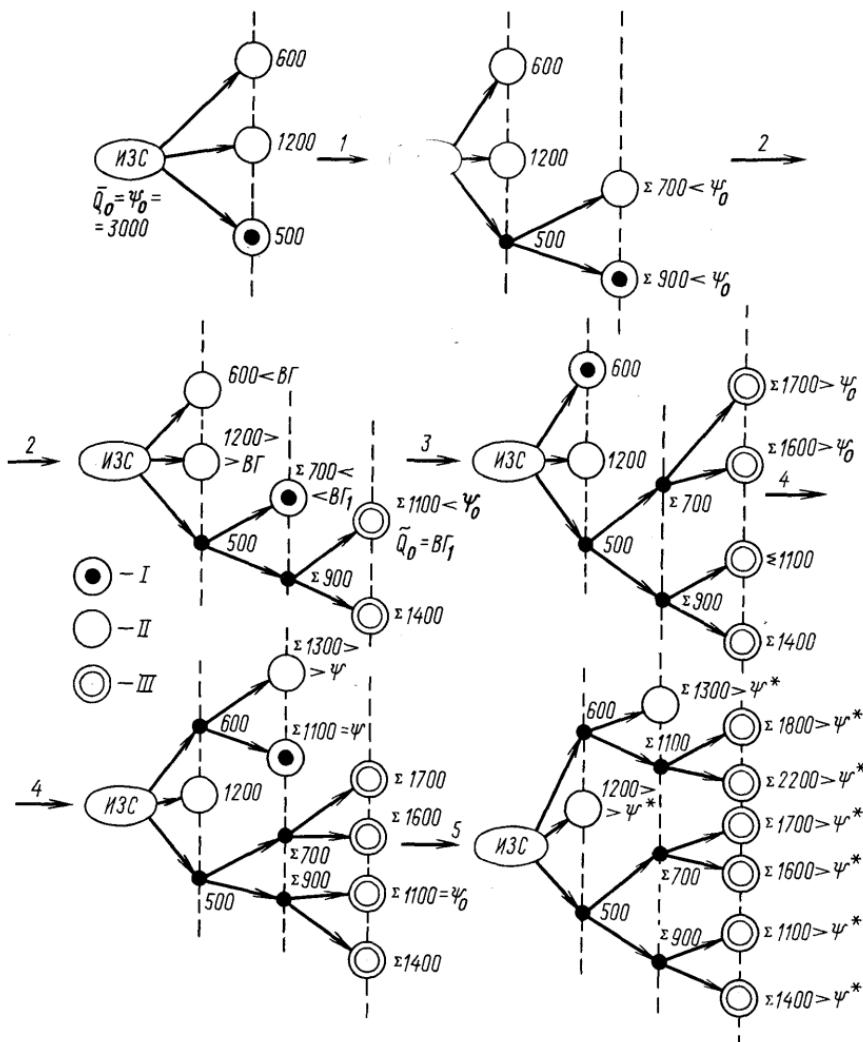


Рис. 8.26. Последовательность генерации эксплицитного ДВР для стратегии «лучевого» ветвления (I–III см. на рис. 8.25)

соответствует  $\Psi^* = \min_i \sum \Psi_i = 500 + 400 + 200 = 1100$ , равно  $N_1 = 13$ . Каждый

раз раскрывается  $k$ -я активная вершина, и для нее значение  $НГ_k = \min_j \sum \Psi_{jk} < ВГ = \Psi_0$ , где  $j$  – число вершин, входящих в цепь ДВР, которая соответствует фрагменту решения.

Последовательность операций генерации усеченного ДВР с использованием лучевого ветвления представлена на рис. 8.26. Общее число сгенерированных вершин  $N_2 = 13$ .

Числа генерированных вершин для двух рассмотренных стратегий ветвления равны только в случае выбора на каждом этапе ветвления активной вершины с минимальной НГ. Если, как это выполняется при наиболее общей стратегии лучевого ветвления, выбирается первая ближайшая активная вершина предыдущего уровня, то число генерированных вершин резко возрастает.

В отличие от стратегии волнового ветвления при стратегии лучевого ветвления число активных вершин, информации о которых хранится в памяти ЭВМ, в 1,5–2 раза меньше.

Однако в случае незначительного приращения величины КЭ при переходе с одного на другой уровень ДВР стратегия лучевого ветвления может привести к полному перебору, и стратегия волнового ветвления наиболее эффективна.

При использовании лучевого ветвления для повышения эффективности поиска с учетом особенностей конкретной задачи целесообразно применять эвристическую оценку для выбора очередной активной вершины ДВР.

## 8.9. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ

В.8-1. Назовите классы исходных задач синтеза ресурсосберегающих ХТС.

В.8-2. В чем различие ИЗС неоднородных и однородных ХТС?

В.8-3. Сформулируйте общую постановку исходной задачи синтеза ресурсосберегающей неоднородной ХТС при известных альтернативных вариантах химического способа производства продукта.

В.8-4. Сформулируйте постановки прямой и обратной задач структурного синтеза оптимальных ХТС с применением поэлементного резервирования.

В.8-5. Назовите основные физико-химические технологические способы ресурсосбережения в ХТС.

В.8-6. Дайте общую характеристику режимно-параметрических и технологических приемов и операций, реализующих различные способы ресурсосбережения в ХТС.

В.8-7. Сформулируйте сущность основных аппаратурно-конструкционных и организационно-технологических приемов и операций, реализующих различные способы ресурсосбережения.

В.8-8. Назовите основные физико-химические и технологические приемы и операции, обеспечивающие увеличение движущей силы ХТП.

В.8-9. Сформулируйте физико-химические и технологические приемы и операции, обеспечивающие наиболее полную переработку сырья в ХТС.

В.8-10. Назовите основные режимно-параметрические приемы и операции, обеспечивающие наиболее полное использование топливно-энергетических ресурсов в ХТС.

В.8-11. Сформулируйте важнейшие технологические и организационно-технические приемы наилучшего функционально-структурного использования аппаратов и машин химической технологии в ХТС.

В.8-12. Сформулируйте сущность организационно-технических способов обеспечения и повышения надежности ХТС.

В.8-13. Объясните, каким образом компоновка оборудования влияет на показатели ресурсосбережения ХТС.

В.8-14. Объясните, какова роль АСУТП в снижении потерь сырья и ТЭР в ХТС.

В.8-15. Сформулируйте основные характерные свойства знаний, используемых при разработке семантических решений ИЗС. В чем различие знаний и данных?

В.8-16. Сформулируйте понятия декларативных и процедурных знаний в химической технологии. Приведите несколько примеров декларативных и процедурных знаний, необходимых при поиске оптимальных решений ИЗС ресурсосберегающих теплообменных систем и систем ректификации зеотропных смесей.

В.8-17. Назовите принципы синтеза ХТС, которые обеспечивают стратегию генерации семантических решений ИЗС.

В.8-18. Сформулируйте сущность ДП-принципа синтеза ХТС.

В.8-19. В чем различие стратегии декомпозиции постановки ИЗС и стратегии декомпозиции множества решений ИЗС?

В.8-20. Сформулируйте сущность стратегии редуктивно-граничной декомпозиции ИЗС.

В.8-21. Сформулируйте понятие «границная задача синтеза». Приведите примеры ГЗС при решении задач синтеза оптимальных теплообменных систем и систем ректификации МКС.

В.8-22. В чем сущность ЭД-принципа синтеза ХТС?

В.8-23. Дайте определение «эвристического правила». Что такое оценочный коэффициент ЭП?

В.8-24. Сформулируйте сущность процедуры обучения выбору оптимальной стратегии декомпозиции ИЗС.

В.8-25. Каким образом определяют оптимальное решение ИЗС на основе ДП- и ЭД-принципов.

В.8-26. Назовите основные этапы поиска оптимального решения ИЗС на основе интегрально-гипотетического принципа.

В.8-27. Запишите математические формулировки процедуры поиска оптимального решения ИЗС на основе ДП-принципа синтеза ХТС.

В.8-28. Запишите математическую постановку задачи поиска оптимального решения ИЗС на основе ИГ-принципа.

В.8-29. Назовите основные этапы поиска оптимального решения ИЗС на основе ЭВ-принципа.

В.8-30. Какие виды эвристик используются при реализации ЭВ-принципа синтеза ХТС?

В.8-31. Какие классы топологических моделей используются для отображения процедур поиска оптимальных решений ИЗС?

В.8-32. Сформулируйте различия процедур полного и ограниченного упорядоченного перебора решений ИЗС на ДВР.

В.8-33. В чем сущность операций упорядоченного полного поиска решений ИЗС: «ветвление в ширину», «ветвление в глубину» и «смешанное ветвление»?

В.8-34. В чем сущность операций упорядоченного ограниченного поиска оптимальных решений ИЗС: «волнового», «лучевого» и «луче-волнового ветвления»?

В.8-35. Сформулируйте общие процедуры, используемые при реализации операций «волнового» и «лучевого ветвления».

В.8-36. Сформулируйте определения следующих понятий: «искусственный интеллект», «эвристическое программирование», «интеллектуальная система».

В.8-37. Приведите примеры неформализованных задач в химической технологии.

3.8-1. Необходимо синтезировать два альтернативных варианта технологической схемы ХТС получения диоксида серы при сжигании серы в воздухе, которые должны удовлетворять следующим ограничениям. Для поддержания в печи для сжигания требуемой низкой температуры можно использовать большое количество охлаждающей воды и инертного газа для разбавления воздуха, поступающего в печь. Для протекания реакции окисления кислородная смесь на входе в печь должна содержать около 70% (мол.) инертного газа и 30% (мол.) кислорода. Можно использовать в качестве инертного газа либо азот, либо диоксид серы.

3.8-2. Составьте блок-схему алгоритма синтеза оптимальных ХТС с использованием теории элементарной декомпозиции постановки ИЗС алгоритма Д-I (см. раздел 8.4.2).

3.8-3. Составьте блок-схему итерационного алгоритма синтеза оптимальных ХТС-алгоритма Д-II (см. раздел 8.4.2) с использованием коррекции исходных оценок  $\Psi^{(i)}$  оптимальных значений КЭ  $\Psi^*$  синтезируемой ХТС и теории элементарной декомпозиции ИЗС.

3.8-4. Составьте блок-схему алгоритма самообучающейся процедуры выбора оптимальной стратегии элементарной декомпозиции постановки ИЗС с использованием набора ЭП, т. е. алгоритма оптимального выбора ЭП на каждом этапе поиска решения ИЗС (см. раздел 8.5.3).

3.8-5. Постройте дерево декомпозиции ИЗС и дерево вариантов решений для синтеза оптимальной теплообменной системы в соответствии с условиями примера 8.

3.8-6. Постройте дерево декомпозиции ИЗС, дерево граничных задач синтеза и ДВР для синтеза оптимальной системы ректификации зеотропной четырехкомпонентной смеси.

3.8-7. Нарисуйте ДВР для синтеза оптимальной технологической схемы ХТС разделения порошка смеси пяти пластмасс (в соответствии с условиями примера 8).

3.8-8. Назовите фазовые состояния веществ, основные физические свойства веществ и способ разделения (движущую силу), которые используются для выбора ХТП дистилляции, абсорбции и экстракции при синтезе ресурсосберегающих ХТС.

3.8-9. Назовите, какие типы ХТП реализуют разделение смеси веществ при синтезе ресурсосберегающих ХТС:

а) жидкий и твердый с крупными частицами материалы; б) твердые материалы с различными размерами частиц; в) жидкий и твердый материалы с различной плотностью.

3.8-10. Назовите фазовые состояния веществ, основные физические свойства веществ и способов разделения (движущую силу), которые используются для выбора ХТП кристаллизации, адсорбции, сушки твердых материалов, осаждения и флотации при синтезе ресурсосберегающих ХТС.

3.8-11. Необходимо построить ДВР для выбора типа ХТП при синтезе оптимальной технологической схемы ХТС разделения смеси четырех веществ  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$  при использовании различных характеристик для двух основных физических свойств этих веществ:

I – размеры частиц (смесь ранжирована по свойству I:  $A, C, B, D$ ); II – растворимость частиц в воде (смесь ранжирована по свойству II:  $A, D, B, C$ ). Ранжирование осуществлено в направлении уменьшения характеристики свойства.

3.8-12. Составьте блок-схемы алгоритмов упорядоченного ограниченного поиска оптимальных решений ИЗС (задача поиска максимума некоторого КЭ) с использованием «волнового» и «лучевого ветвления» на ДВР.

3.8-13. Составьте математическое выражение для условия окончания процедуры упорядоченного ограниченного поиска оптимального решения при операциях «лучевого» и «волнового ветвления» на ДВР.

## Глава 9

# ДЕКОМПОЗИЦИОННО-ЭВРИСТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ СИНТЕЗА РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ХТС

## 9.1. МНОГОСТАДИЙНЫЙ ЭВРИСТИЧЕСКО-ЭВОЛЮЦИОННЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ХТС

Метод позволяет разрабатывать технологические схемы с минимальными потерями сырья, топлива и энергии, выбирать целесообразную совокупность совмещенных типовых ХТП, соответствующих различным аппаратам схемы, определять оптимальные

параметры ХТП и аппаратов и создавать рациональные обратные технологические связи между аппаратами, которые обеспечивают наиболее полную рекуперацию сырья и энергии ХТС. На каждой стадии метода выполняются взаимосвязанные эвристические операции генерации некоторого технологического решения и вычислительные операции анализа сгенерированного решения, которое имеет смысловой характер и представлено в виде семантического или потокового графа ХТС. Кратко рассмотрим основные операции пяти стадий метода.

I. Выбор рационального химического способа получения заданных целевых продуктов и предварительная оценка эффективности синтезируемой ХТС.

II. Разработка исходной структуры и определение состава технологических потоков ХТС: II-1 – синтез исходной структуры покомпонентных материальных и энергетических связей ХТС путем построения первоначальных вариантов материальных потоковых графов по расходам химических компонентов и исходного теплового потокового графа; II-2 – количественная оценка и коррекция предварительно выбранных покомпонентных материальных и энергетических связей ХТС; II-3 – распределение химических компонентов по возможным технологическим потокам ХТС путем построения исходных материального и параметрического потоковых графов; II-4 – анализ различий информационных переменных и разработка уточненной структуры технологических потоков ХТС в виде уточненного параметрического потокового графа.

III. Разработка альтернативных вариантов операторной схемы ХТС: III-1 – определение типовых технологических операторов ХТС; III-2 – оценка физических свойств химических компонентов для целей выбора требуемых технологических операций разделения; III-3 – выбор типовых технологических операторов разделения; III-4 – анализ реализуемости типовых технологических операторов разделения.

IV. Разработка и анализ альтернативных вариантов технологической схемы ХТС путем модификации структуры технологических связей, а также путем перегруппировки, исключения и выбора оптимальной совокупности типовых технологических операторов, соответствующих различным аппаратам ХТС, в которых могут протекать совмещенные ХТП.

V. Оптимизация параметров элементов и технологических потоков для перспективных вариантов технологической схемы синтезируемой ХТС.

Рассмотрим сущность и основные этапы диалогового эвристическо-семантического алгоритма (ДЭС-алгоритма), который реализует на ЭВМ стадии генерации альтернативных вариантов операторной и технологической схем ресурсосберегающей ХТС.

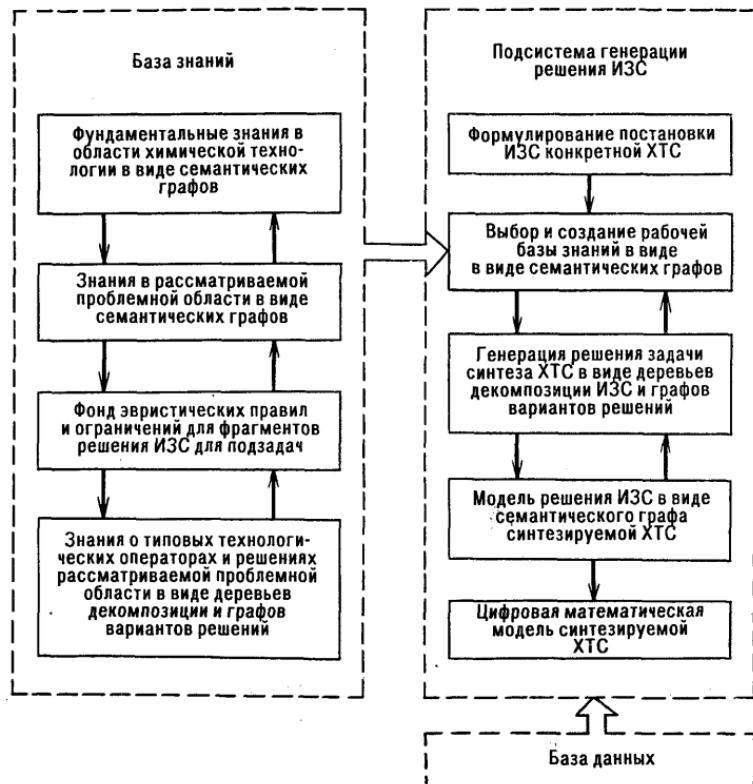


Рис. 9.1. Обобщенная функциональная структура интеллектуальной системы генерации альтернативных вариантов технологических схем неоднородных ХТС (1 – лицо, принимающее решение)

При разработке ДЭС-алгоритма генерации структуры ХТС в качестве ПО рассматривается определенная подотрасль промышленности, выпускающая заданные целевые продукты. Для ПО создаются база знаний (БЗ) и база данных, которые образуют интеллектуальное и информационное обеспечение ИС генерации структур неоднородных ХТС (рис. 9.1). БЗ создается на основе построения в диалоговом режиме моделей представления знаний в виде фреймов (ФР), семантических (смыслоных) графов.

Фрейм – это минимальное смысловое описание в словесной структурно-классифицированной форме иерархических знаний о некотором стереотипном понятии (ХТП, технологическом потоке, аппарате химической технологии и т. п.).

При поиске решений ИЗС используются с позиций познавательного назначения следующие типы ФР: фреймы-объекты, фреймы-операции и фреймы-ситуации. ФР-объекты отображают

знания о различных объектах химической технологии, которыми являются химические вещества, технологические потоки, процессы и аппараты химической технологии и т. п. ФР-операции и ФР-ситуации отображают знания о различных законах химической технологии, о разнообразных физико-химических явлениях, происходящих в аппаратах ХТС; о возможном взаимодействии различных обстоятельств, влияющих на функционирование ХТП и ХТС, прежде всего о принципах наилучшего использования движущей силы ХТП, наиболее полного использования сырья и энергии в ХТС, а также об операциях творческой деятельности человека при поиске решений ИЗС; о вычислительных процедурах, осуществляемых ЭВМ при математическом моделировании, анализе и оптимизации ХТП и ХТС и др. ФР-операции и ФР-ситуации наиболее широко используются для представления многообразных эвристических правил. Эвристика, или эвристическое правило, представляет собой утверждение или суждение, относящееся к декларативному или процедурному знанию, которое принципиально позволяет значительно ограничить множество возможных рациональных решений  $\{E\}$ .

Информационная структура ФР представляет собой совокупность иерархически упорядоченных блоков-вопросов и взаимосвязанных с ними блоков-ответов. Блоки-вопросы содержат разнообразные вопросы, которые необходимо задать ЛПР для установления смысла и сущности рассматриваемого стереотипного объекта.

Блоки-ответы фрейма содержат разносторонние конкретные сведения о смысле, сущности и целях существования исследуемого объекта. С каждым блоком-вопросов может быть связано произвольное число незаполненных или пустых блоков-ответов, называемых *слотами*. Слоты заполняются ЛПР и принципиально позволяют ему использовать свои интеллектуальные способности для углубления и расширения знаний о рассматриваемом объекте. С учетом ситуативности отношений между знаниями выбор ЛПР среди множества ответов определенного ответа на тот или иной вопрос фрейма может изменяться в зависимости от ответов на предыдущие вопросы ФР. В качестве блоков-ответов могут быть использованы другие ФР, что обеспечивает классификационные взаимосвязи и определенные ситуационные отношения между различными ФР. Взаимосвязанную совокупность ФР будем называть *сетью фреймов*.

Примерами ФР-объектов являются «ФР-технологический поток», информационная структура которого показана на рис. 9.2, «ФР-процесс ректификации», «ФР-процесс теплообмена». К типу ФР-операций относятся «ФР-основные технологические способы наиболее полного использования сырья и энергии в ХТС», «ФР-основные технологические способы энергосбережения в

ациклических ректификационных системах» и «FR-выбор модуля расчета параметров состояний тепловых процессов».

Примерами FR-ситуаций являются «FR-влияние изменений условий проведения обратимой реакции на сдвиг положения равновесия», а также «FR-инженерно-технологические принципы трассировки внутрицеховых трубопроводов», «FR-способы размещения крупногабаритного оборудования ХТС» и «FR-принципы высотного расположения оборудования ХТС», которые позволяют создать диалоговые алгоритмы оптимизации компоновки ресурсосберегающих ХТС.

*Семантический граф* (СМГ) – это граф, отображающий отношения или взаимосвязи между различными понятиями некоторой ПО, которые необходимы при генерации семантического решения ИЗС. СМГ может, например, отображать эвристическо-смысловые и эвристическо-вычислительные операции поиска оптимального решения  $P^* \in \{E\}$  на основе переработки как декларативных, так и процедурных знаний из некоторой проблемной области. Вершины СГ отображают основные понятия или сведения проблемной области (объекты, события или явления), которые образуют семантическое решение ИЗС.

Вершины семантических графов могут также отображать знания о способах ресурсосбережения в ХТС, о физико-химической сущности функционирования и об особенностях инженерно-аппаратурного оформления ХТП, а также об имеющихся вычислительных модулях для расчета ХТП, которые могут входить в структуру синтезируемой ХТС.

Дуги графов отображают семантически-целевые связи между указанными понятиями или знаниями.

Таким образом, рассмотренные ранее деревья вариантов решений ИЗС (см. раздел 8.8) представляют собой одну из разновидностей семантических графов.

В рассматриваемом ДЭС-алгоритме разработка рабочей БЗ в виде расширенного семантического графа (рис. 9.3) осуществляется по следующим этапам:

1) выбор целевого продукта – химического компонента, выбор маршрута химического синтеза для получения данного продукта;

2) определение варианта инженерно-аппаратурного оформления технологических операторов или ХТП, использование которого в структуре ХТС позволяет реализовать данный маршрут;

3) определение варианта инженерно-аппаратурного оформления и структуры операции химического превращения;

4) определение известных вариантов технологических схем, включая действующие схемы, литературные и патентные сведения;

5) расшифровка смысла технологических операторов, входящих в описание известных технологических решений;

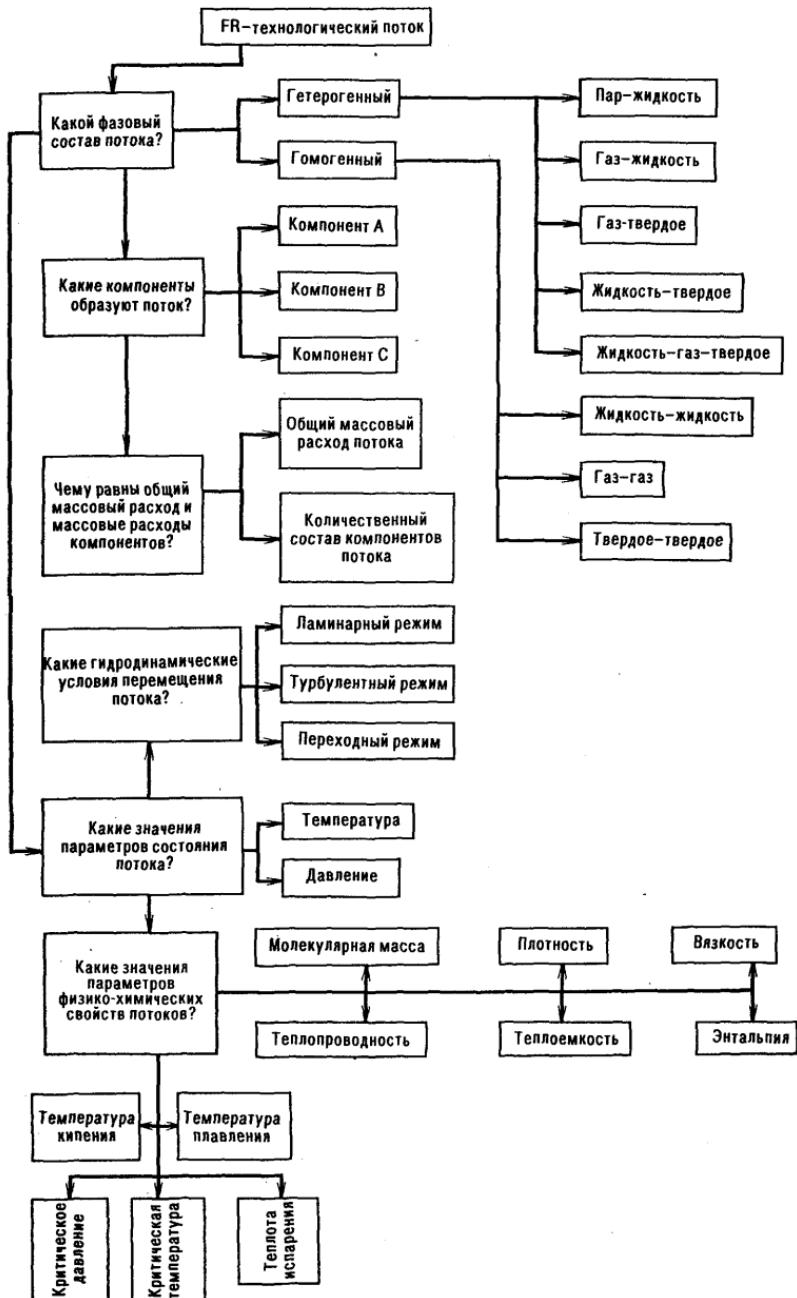


Рис. 9.2. Информационная структура фрейма-объекта «FR-технологический поток»

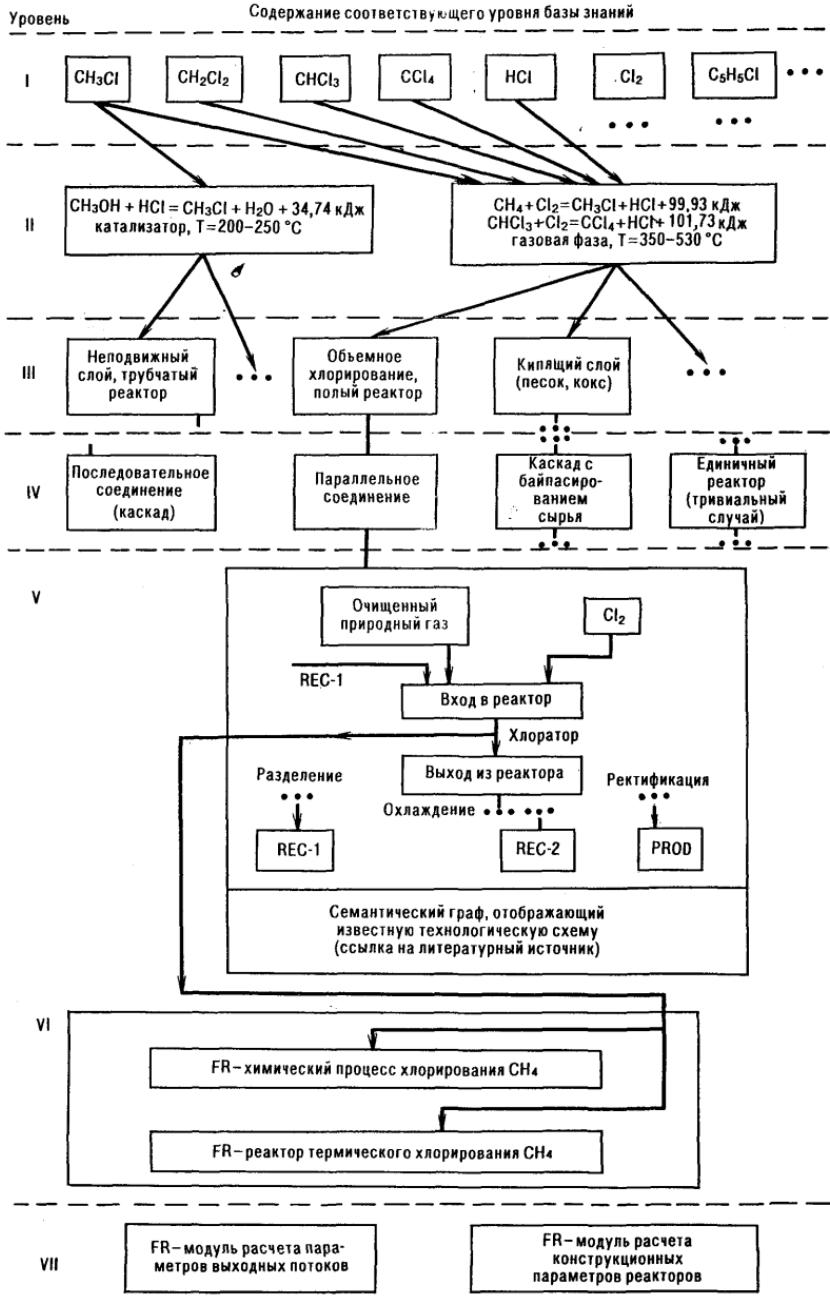


Рис. 9.3. Фрагмент базы знаний в виде семантического графа для решения задач синтеза неоднородных ХТС производств хлорорганических продуктов:

REC; PROD – технологические потоки; FR – фрейм

6) выбор модуля расчета ХТП, реализующего данный технологический оператор. Модули необходимы для определения с желаемой степенью точности параметров аппаратов и потоков генерированных технологических структур химико-технологической системы.

Неотъемлемым элементом, который отличается автономностью, является фонд знаний ПО. В базу знаний входят сведения самого различного характера, что позволяет их эффективно использовать при генерации вариантов ХТС. База данных представляет собой банк физико-химических и теплофизических свойств компонентов и смесей веществ для рассматриваемой проблемной области.

Анализ физико-химической сущности отдельных ХТП и типовых схем позволяет выделить основные технологические операторы и технологические стадии (операции) проблемной области. На основе этого анализа создают таблицы выбора определенного технологического оператора в зависимости от требуемого изменения состояния технологического потока в структуре синтезируемой ХТС.

Разработка алгоритма генерации альтернативных вариантов ХТС базируется на ДП- и ЭД-принципах синтеза ХТС, в соответствии с которыми строится дерево декомпозиции ИЗС любой ХТС проблемной области. Основные этапы ДЭС-алгоритма генерации альтернативных вариантов ХТС:

1) уточнение и коррекция постановки исходной задачи синтеза ХТС, в которой содержатся списки целевых продуктов, требуемых и (или) недопустимых ХТП, некоторые физико-химические и технологические предпосылки и другая информация; для этого вводится ряд дополнительных ограничений;

2) осуществление декомпозиции ИЗС и множества решений задачи; выбор ЛПР из базы знаний и базы данных в диалоговом режиме рабочего методического и информационного обеспечения для принятия решений; указанный шаг осуществляется построением расширенного семантического графа вариантов решения ИЗС. Граф строится на основе выделения из базы знаний класса известных технологических решений, отображаемых в виде семантических графов с последующим объединением однотипных вершин этих графов. В расширенный граф включаются так называемые «пустые» ветви, которые позволяют ЛПР принять оригинальное решение по вводу в структуру ХТС некоторого ХТП, отсутствующего в базе знаний;

3) операция выбора очередного технологического оператора и соответствующих ему ХТП, которая проводится ЛПР в диалоговом режиме на основе результатов анализа сгенерированного фрагмента схемы: а) различий между параметрами текущего состояния системы и заданным конечным состоянием ХТС; б) рекомендаций фонда эвристик; в) таблицы выбора требуемо-

го технологического оператора и ХТП; г) предложений исходного расширенного семантического графа;

4) ЛПР совместно с ЭВМ выполняет усечение расширенного семантического графа на основе сформулированных в уточненной постановке ИЗС ограничений. Для этого ЛПР исключает «неперспективные» вершины и ветви, применяя как качественно-смысловые оценки, так и количественные оценки в виде величины приведенных затрат;

5) осуществление на ЭВМ с использованием соответствующего модуля расчета или моделирования выбранного ХТП, которое позволяет принять окончательное решение о целесообразности включения этого ХТП в структуру ХТС;

6) после генерации фрагмента схемы или ХТС в целом на ЭВМ проводится моделирование сгенерированной ХТС, результаты которого позволяют ЛПР выявить «узкие места» в схеме и принять решение о завершении генерации структуры ХТС либо о коррекции исходных ограничений в начале новой итерации процесса генерации структуры ХТС шага 1.

Результирующий семантический граф, который получен в режиме диалога ЛПР с ЭВМ, отображает смысловую информацию о технологической структуре сгенерированных альтернативных вариантов ХТС. Эта информация является исходной для четвертой стадии метода.

## 9.2. ПОСТАНОВКА ИСХОДНЫХ ЗАДАЧ СИНТЕЗА РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ТЕПЛООБМЕННЫХ СИСТЕМ

Содержательная постановка общей задачи синтеза ресурсосберегающих теплообменных систем (ТС) имеет следующий вид. Дано определенное множество исходных горячих технологических потоков (ГРТП):  $\{S_{r-i} / i = 1, m\}$ , которые должны быть охлаждены, и определенное множество холодных технологических потоков (ХЛТП):  $\{S_{x-j} / j = 1, n\}$ , которые необходимо нагреть. Каждый из исходных технологических потоков (ИТП) может находиться в жидком или газообразном состоянии. Для каждого  $k$ -го ИТП известны его параметры состояния (массовый расход  $W_k$ ; начальная  $t_k^h$  и требуемая конечная  $t_k^c$  температуры) и стандартные параметры свойств (относительная плотность  $\rho_k^{20}$  при  $20^\circ\text{C}$ , кинематическая вязкость  $v_k^{20}$  и  $v_k^{50}$  при  $20$  и  $50^\circ\text{C}$ ; теплоемкость  $c_k$ ).

Необходимо определить технологическую топологию ТС, состоящей из совокупности рекуперативных ТА, дополнительных холодильников и (или) нагревателей, использующих технологические потоки вспомогательных хладо- (ВХА) и теплоагентов (ВТА), а также рассчитать значения тепловых нагрузок  $Q_p$  и поверхностей теплообмена всех ТА системы, которые обеспечивают достижение ИТП требуемых значений конечных темпера-

тур при минимальной величине КЭ в виде приведенных затрат на ТС (1.6) с учетом следующих основных предпосылок:

Т1) используют стандартные двухпоточные кожухотрубчатые ТА противоточного типа;

Т2) в процессе теплообмена между технологическими потоками в каждом ТА может происходить изменение агрегатного состояния потоков;

Т3) процесс теплообмена между потоками должен быть термодинамически реализуем;

Т4) в процессе теплообмена между потоками с заданными значениями их начальных температур в каждом ТА происходит передача максимально возможного количества тепла  $Q_{\max}$ .

Величину  $Q_R = Q_{\max}$  определяют, исходя из значений полных энталпий ГРТП  $Q_r$  и ХЛТП  $Q_x$ , начальных и конечных температур ИТП, а также из  $\Delta t^*$  на концах ТА, в результате этого для ТС потребность во вспомогательных хладо- и теплоагентах, зависящая от величины остаточных энталпий ИТП, является минимальной;

Т5) каждая пара потоков участвует в теплообмене не более одного раза;

Т6) не допускается разделения массовых расходов потоков на параллельные части;

Т7) значение коэффициента теплопередачи  $h_{ij}$  для процесса теплообмена между  $i$ -ым и  $j$ -ым потоками в каждом ТА вычисляется с необходимой степенью точности; для этого используются библиотеки модулей расчета процессов теплообмена (см. гл. 3);

Т8) на завершающем этапе генерации технологической схемы ТС проводят модификацию технологической структуры синтезированной ТС, заменяя определенные совокупности малых ТА меньшим числом ТА больших размеров, что обеспечивает снижение капитальных затрат на ТС. Указанные предпосылки влияют на особенности технологической структуры синтезируемых ТС (ациклическая или рециклическая) и на мощность множества решений ИЗС.

При разработке методов решения ИЗС используют два вида технологических стратегий синтеза ТС: стратегию раздельного и совместного синтеза внутренней и внешних подсистем.

*Внутренняя подсистема* (ВТПС) состоит из совокупности рекуперативных ТА, обеспечивающих рекуперацию наибольшей тепловой энергии  $Q_R$  в процессе теплообмена между ИТП.

*Внешняя подсистема* (ВШПС) включает дополнительные холодильники и нагреватели, которые расположены после всех рекуперативных ТА на периферии ТС.

Стратегия совместного синтеза позволяет получить ТС комбинированной структуры, в которой холодильники и нагреватели, использующие внешние теплоносители, расположены меж-

ду рекуперативными ТА. Эта структура более эффективна, чем декомпозиционная структура ТС, которая получается в случае применения стратегии раздельного синтеза. Учет ограничений Т1–Т8 позволяет резко сократить размерность множества решений ИЗС и получить наиболее эффективную ациклическую структуру ТС с минимальной поверхностью теплообмена, если наряду с этим использовать для организации процесса теплообмена между потоками эвристическое правило ЭП-Т1: для заданной величины рекуперируемого тепла исходных потоков последовательно выбирать варианты теплообмена между самым высокотемпературным из горячих ( $\max t_r^h$ ) и холодных ( $\max t_x^k$ ) потоков.

Для представления технологических взаимосвязей между ТА, входящими в синтезируемую ТС, необходимо поставить в соответствие каждому ИТП совокупность исходного начального потока, исходного конечного потока и нескольких результирующих технологических потоков (РТП).

*Исходный начальный горячий (холодный) поток – это поток с энталпией:*

$$Q_{r-i}^h (Q_{x-j}^h) = W_{r-i(x-j)} c_{i(j)} t_{r-i(x-j)}^h,$$

где  $t_{r-i(x-j)}^h$  – начальная температура  $i(j)$ -го ИТП;  $W_r$  – водяной эквивалент горячего потока.

*Исходный конечный горячий (холодный) поток – это поток с энталпией:*

$$Q_{r-i}^k (Q_{x-j}^k) = W_{r-i(x-j)} c_{i(j)} t_{r-i(x-j)}^k,$$

где  $t_{r-i(x-j)}^k$  – конечная температура  $i(j)$ -го ИТП.

*Результирующие технологические потоки – это потоки, которые могут быть получены на выходе каждого ТА в результате рекуперативного теплообмена ИТП. Массовые расходы РТП равны массовым расходам соответствующих ИТП. Полученные РТП также могут обмениваться теплом в некоторых ТА с другими РТП и (или) ИТП.*

Выделим два вида РТП – промежуточные и дополнительные потоки. *Промежуточные потоки – это РТП, которые получаются из ИТП в результате взаимного преобразования их начальных температур в нескольких ТА и имеют такие температуры, которые соответствуют условию термодинамической реализуемости процесса теплообмена. Дополнительные потоки – это РТП, соответствующие остаточной доле тепловой энергии ИТП, которая должна быть рекуперирована в ТС при использовании только вспомогательных тепло- и хладагентов, чтобы обеспечить получение требуемых конечных потоков.*

При выполнении условия максимальной передачи тепла в каждом ТА в синтезируемой ТС могут образовываться один или два РТП, а применение различных эвристических правил для

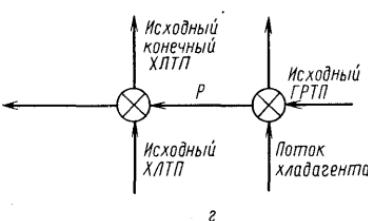
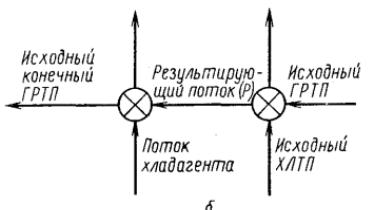
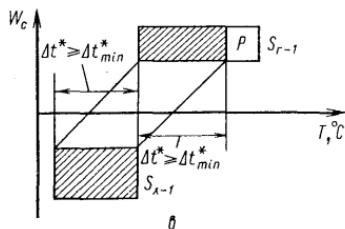
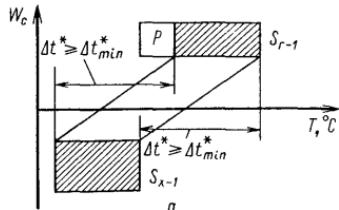


Рис. 9.4. Энталпийные диаграммы и операторные схемы синтезированных ТС для вариантов процессов теплообмена двух исходных технологических потоков: ХЛТП с высокотемпературной частью ГРП (а, б); ХЛТП (в, г) с низкотемпературной частью ГРП ( $W_c$  – водяной эквивалент)

организации процесса теплообмена в каждом ТА может привести к использованию ТА с различными поверхностями теплообмена, что позволяет получить альтернативные варианты синтезируемых ТС. На рис. 9.4 приведены энталпийные диаграммы и операторные схемы синтезируемых ТС для различных альтернативных вариантов организации процесса теплообмена в ТА между ГРП и одним ХЛТП при выполнении указанных выше условий Т3 и Т4.

Если при решении ИЗС ограничение Т4 снять, то в синтезируемой ТС становятся возможными варианты организации процесса теплообмена между ИТП с образованием трех и четырех РТП. Это обусловливает возможность получения значительного числа альтернативных вариантов технологической топологии синтезируемой ТС, включая циклические структуры, что весьма увеличивает трудоемкость и ограничивает практическую возможность решения ИЗС.

### 9.3. ДЕКОМПОЗИЦИОННЫЕ МЕТОДЫ СИНТЕЗА РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ ТЕПЛООБМЕННЫХ СИСТЕМ

Для решения задач синтеза ресурсосберегающих ТС разработаны гранично-декомпозиционный, декомпозиционно-эвристический и топологический методы.

Сущность гранично-декомпозиционного метода синтеза ТС, базирующегося на ДП-принципе синтеза ХТС, состоит в том, что оптимальное решение ИЗС находят путем ограниченного пере-

бора решений некоторого конечного многоуровневого множества ГЗС. Для каждой ГЗС  $\tilde{P}_i$  множество ее решений представляет собой совокупность технологических схем ТС, в которых обязательно имеются операции теплообмена между  $i$ -ым горячим и  $j$ -ым холодным потоками. Для ГЗС любого последующего уровня декомпозиция включает дополнительную пару исходных и (или) результирующих потоков, которые обязательно должны участвовать в операции теплообмена.

ГЗС нулевого уровня  $\tilde{P}_0$  это такая задача, решение которой представляет собой ТС в виде совокупности только холодильников и нагревателей. Значение величины приведенных затрат для решения  $\tilde{P}_0$  будем использовать как исходную величину ВГ  $\Psi_0 = \Pi_0$  при поиске  $\mathcal{P}^*$  на дереве ГЗС с применением стратегии перспективно-отсекающей декомпозиции. Каждое решение ИЗС и ГЗС получают на основе стратегии элементарной декомпозиции ИЗС в виде совокупности конечных теплообменных маршрутов исходных потоков.

Конечный теплообменный маршрут, или просто маршрут ТП, определяет некоторый промежуточный (или результирующий) выходной поток ТС, полученный в результате процесса теплообмена между этим  $i$ -ым исходным потоком и другими исходными и внутренними потоками системы. Иными словами, маршрут  $i$ -го горячего (холодного) потока представляет собой часть варианта технологической структуры ТС, которая отражает последовательность операций теплообмена  $i$ -го потока с одним или несколькими потоками ТС.

Пусть  $i$  – некоторый горячий ТП, а  $j$  – один из холодных ТП системы. Тогда символическое обозначение маршрута  $(i, j)$  определяет выходной промежуточный холодный поток, полученный в ТС при нагревании  $j$ -го холодного потока  $i$ -ым горячим потоком. Символическое обозначение маршрута  $[i, j]$  определяет выходной промежуточный горячий поток, полученный в ТС при охлаждении  $i$ -го исходного горячего потока  $j$ -ым исходным холодным ТП. Например, обозначение маршрута  $[[1, (2, 3)], 4]$  определяет выходной горячий поток, полученный в ТС из исходного горячего потока  $S_{M-1}$  следующим образом: сначала исходный горячий поток  $S_{M-1}$  охлаждается промежуточным холодным потоком, получившимся в результате теплообмена между исходными потоками  $S_{N-2}$  и  $S_{M-3}$ , и затем охлаждается исходным холодным потоком  $S_{N-4}$ . Операторная схема для маршрута исходного ТП  $S_{M-1}$  вида  $[[1, (2, 3)], 4]$  представлена на рис. 9.5.

Символические обозначения маршрутов  $i, C$  и  $j, H$  определяют соответственно выходной поток, полученный в ТС охлаждением  $i$ -го исходного горячего потока внешним хладоносителем  $C$ , и выходной поток, полученный в ТС нагреванием  $j$ -го исходного холодного потока внешним теплоносителем  $H$ .

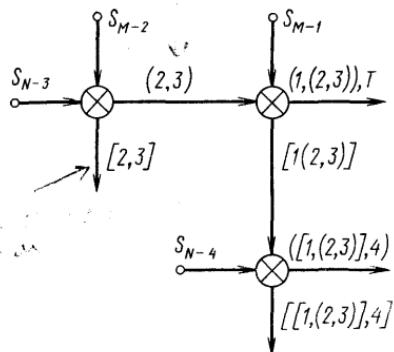


Рис. 9.5. Операторная схема для маршрутов исходного горячего технологического потока  $s_{M-1}$  вида  $[[1,(2,3)], 4]$  и  $[1,(2,3)], T$ :

$s_{M-1}, s_{M-2}$  – горячие технологические потоки;  
 $s_{N-3}, s_{N-4}$  – холодные технологические потоки теплообменной системы

Введение в символическую запись маршрута технологического потока индекса  $T$  означает, что температура потока доведена до требуемого значения и он не участвует в дальнейшем теплообмене в ТС. Например, символическое обозначение маршрута ТП  $(1, 3)$ ,  $H$  определяет результирующий поток, который получен в ТС в результате теплообмена между горячим потоком  $s_{M-1}$  и холодным потоком  $s_{N-3}$ , а затем дополнительного догрева внешним теплоносителем  $H$ . Символическое обозначение маршрута технологического потока  $[1, (2, 3)]$ ,  $T$  определяет результирующий холодный ТП заданной температуры, который получен в ТС после теплообмена исходного горячего потока  $s_{M-1}$  с выходным промежуточным холодным потоком  $(2, 3)$ , образованным после теплообмена исходного горячего потока  $s_{M-2}$  и исходного холодного потока  $s_{N-3}$  (см. рис. 9.5).

Чтобы теплообменный маршрут отвечал некоторой физически реализуемой схеме ТС, он должен удовлетворять следующему критерию: номер любого исходного или результирующего выходного потока в одном маршруте должен встречаться не более одного раза. Маршруты, отвечающие этому критерию, называют реализуемыми. Так, маршрут  $[(1, 2)], 3, 2], H$  не является реализуемым, поскольку поток 2 встречается в записи дважды. Маршрут означает, что поток 2 одновременно обменивается теплом с потоками 1 и 3. Такая нереализуемая ситуация будет обозначаться знаком  $\sim$ .

Совокупность вариантов маршрутов ТП для каждого из исходных горячих и холодных потоков представляет собой решение некоторой ГЗС (либо ИЗС).

Каждому маршруту ТП можно поставить в соответствие некоторую величину критерия эффективности ТС – величину приведенных затрат. Для маршрутов, полученных в результате теплообмена между исходными потоками, приведенные затраты вычисляют по следующей формуле:

$$\Pi = (1/2) \Sigma \Pi_{np} + (1/2) (\Pi/\tau), \quad (9.1)$$

где  $\Sigma_{\text{пр}}$  – сумма затрат на обработку исходных потоков, предшествующую процессу теплообмена в элементе ТС, в результате которого образовался рассматриваемый маршрут, руб./год; Ц – стоимость теплообменника, руб.;  $\tau$  – срок амортизации, год.

Границно-декомпозиционный метод состоит из трех основных этапов:

1) создание ГЗС первого уровня декомпозиции ИЗС, в которых оптимальный вариант технологической схемы определяется в виде совокупности маршрутов исходных потоков;

2) последовательная иерархическая многоуровневая декомпозиция ГЗС первого уровня, в результате которой достигается необходимое снижение размерности граничных задач проектирования, что позволяет значительно сократить объем вычислительных операций при определении оптимального решения ИЗС;

3) нахождение оптимального варианта технологической схемы ТС, а также оптимальных значений технологических и конструкционных параметров элементов системы в результате решения полученного множества ГЗС. При этом отбрасывают те граничные задачи, которые заранее не содержат оптимального варианта искомой технологической схемы, что устанавливают, используя определенные граничные оценки для значений КЭ возможных решений этих задач.

Критерий эффективности ТС, т. е. величина приведенных затрат  $\Pi$  (руб./год), в общем случае, является сложной функцией следующих переменных:

$$\Pi = f(G, \mathcal{K}, \bar{D}, \bar{X}, \bar{Y}), \quad (9.2)$$

где  $G$  – технологическая топология системы;  $\mathcal{K}$  – тип элементов подсистемы;  $\bar{D}$  – вектор технологических и конструкционных параметров элементов подсистемы;  $\bar{X}$  – вектор параметров входных технологических потоков;  $\bar{Y}$  – вектор параметров выходных технологических потоков.

В соответствии с постановкой ИЗС (см. раздел 9.2)  $\mathcal{K}$ ,  $\bar{X}$  и  $\bar{Y}$  являются заданными величинами при разработке оптимальной технологической схемы системы. Поэтому для решения ИЗС необходимо определить  $G^*$  и  $\bar{D}^*$ , при которых  $\Pi(G^*, \bar{D}^*) = \min \Pi(G, \bar{D})$ . Но учитывая, что  $\bar{D} = \phi(\mathcal{K}, \bar{X}, \bar{Y}, G)$  при синтезе  $G, \bar{D}$  ТС для выполнения конкретного технологического задания, можно считать, что

$$\Pi = f^{(1)}(G). \quad (9.3)$$

Таким образом, в результате синтеза ТС требуется получить  $G^*$  такое, чтобы

$$\Pi(G^*) = \min_G \Pi(G) \text{ при } G \in E, \quad (9.4)$$

где  $E$  – множество всех возможных вариантов технологической схемы.

Первый этап метода состоит в замене ИЗС ( $P$ ) множеством  $P_1 \{p_j/j = 1, r\}$  задач первого уровня декомпозиции меньшей размерности, которые являются ГЗС в том смысле, что они все вместе удовлетворяют следующему условию:

$$Z = (\exists G^*) (\exists \Pi_j(G^*)) [\underline{\psi}_j \leq \Pi(G^*)], \quad (9.5)$$

где  $\underline{\psi}_j$  – нижняя граница для оптимального решения граничной задачи.

Каждая ГЗС  $\tilde{P}_j \in P_1$  имеет вид: определить  $G_j^*$  такое, чтобы

$$\Pi_j(G_j^*) = \min_{G_j} \Pi_j(G_j) \text{ при } G_j \in \tilde{E}_j \subset E, \quad (9.6)$$

где  $\tilde{E}_j$  – множество решений ГЗС  $\tilde{P}_j$ .

Теперь предположим, что получено оптимальное решение  $G_j^*$  каждой граничной задачи  $\tilde{P}_j \in \tilde{P}_1$  и определено  $G_k^*$  такое, чтобы

$$\Pi_k(G_k^*) = \min_{\tilde{P}_j \in \tilde{P}_1} \Pi_j(G_j^*). \quad (9.7)$$

Тогда

$$\Pi_k(G_k^*) = \Pi(G_k^*) \quad (9.8)$$

и  $G_k^*$  является оптимальным решением ИЗС ( $S$ ), т. е. определяет искомую технологическую схему ТС, соответствующую минимуму приведенных затрат.

Для составления граничных задач первого уровня декомпозиции ИЗС, удовлетворяющих условию (9.5), используют ЭП: заменить рассмотрение множества вариантов технологической схемы ТС рассмотрением множества маршрутов ( $n + m$ ) исходных потоков. Для определения числа ГЗС первого уровня декомпозиции также используют ЭП: решение каждой ГЗС должно включать операцию теплообмена между любыми двумя исходными потоками ( $i$ -ым горячим и  $j$ -ым холодным,  $i = 1, n$ ;  $j = 1, m$ ). Таким образом, число ГЗС первого уровня  $r \leq (n \times m)$ . Случай  $r < (n \times m)$  возможен тогда, когда теплообмен между некоторыми исходными потоками невозможен из-за термодинамических ограничений. Алгоритм составления множества ГЗС первого уровня декомпозиции ИЗС показан на рис. 9.6.

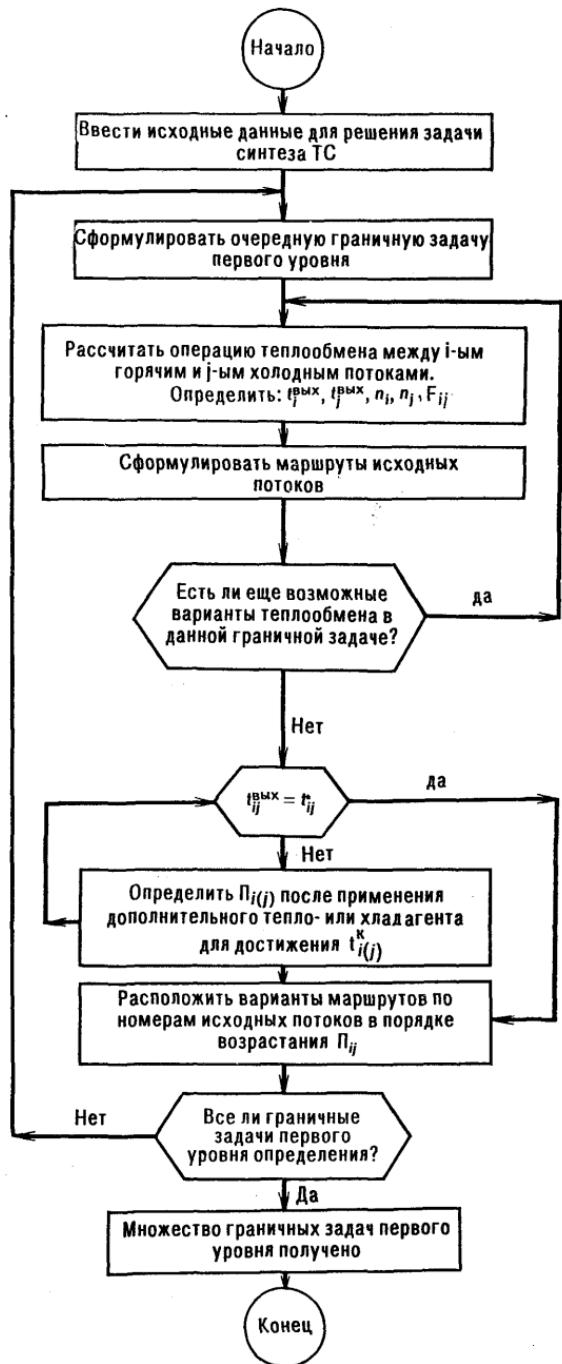
Некоторое решение  $G_j$  граничной задачи  $\tilde{P}_j \in \tilde{P}_1$  можно представить следующим образом:

$$G_j = \bigcup_{i=1, (n+m)} g_{jik_i}, \quad (9.9)$$

где  $g_{jik_i}$  –  $k$ -ый вариант маршрута  $i$ -го исходного потока в ГЗС  $\tilde{P}_j$ .

Рис. 9.6. Алгоритм составления множества граничных задач первого уровня декомпозиции исходной задачи синтеза оптимальной технологической схемы ТС:

$t_{i(j)}^{\max}$  – температура потока  $i(j)$  на выходе из элемента подсистемы;  $F_{ij}$  – поверхность теплообмена элемента подсистемы, реализующего операцию теплообмена между потоками  $i$  и  $j$



Значение нижней оценки КЭ для оптимального решения любой ГЗС  $\tilde{P}_j \in \tilde{P}_I$  вычисляют по формуле:

$$\Psi_j = \sum_{i=1}^{n+m} \Pi_{(1i)j}, \quad (9.10)$$

где

$$\Pi_{(1i)j} = \min_k \Pi_{(ki)j}; \quad k = \overline{1, t_{ij}};$$

$t_{ij}$  – число вариантов маршрута  $i$ -го исходного потока в ГЗС  $\tilde{P}_j$ .

Таким образом, для  $\Psi_j$  всегда справедливо соотношение:

$$\Psi_j \leq \Pi(G_j^*), \quad \text{где } G_j^* \in E_j. \quad (9.11)$$

Вторым этапом метода является иерархическая (многоуровневая) декомпозиция полученных ГЗС первого уровня с целью дальнейшего снижения их размерности. Процесс многоуровневой декомпозиции ГЗС осуществляют следующим образом. На каждом  $i$ -м уровне декомпозиции множество ГЗС  $i$ -го уровня  $P_i$  получают из задач  $(i-1)$ -го уровня, используя ЭП: решения задач  $i$ -го уровня декомпозиции должны включать по крайней мере  $q_i = i$  операций теплообмена, конкретно определенных для каждой граничной задачи  $i$ -го уровня. Декомпозицию ГЗС продолжают до тех пор, пока не получат множество задач такой размерности, при которой они могут быть решены простым перебором незначительного числа совокупностей вариантов маршрутов исходных потоков.

Стратегию выполнения второго этапа метода синтеза оптимальных ТС можно представить в виде прадерева ГЗС (рис. 9.7),

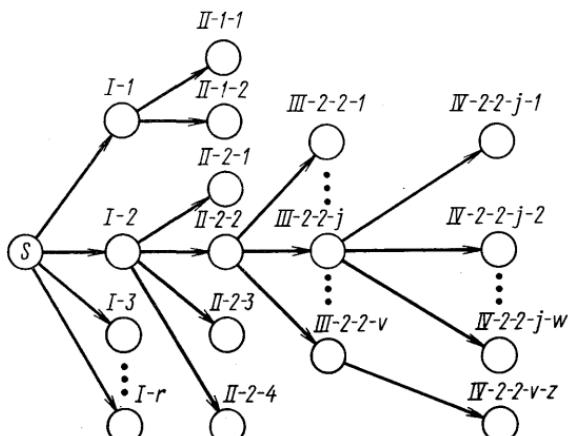


Рис. 9.7. Прадерево граничных задач синтеза теплообменных систем:

I–IV – уровни декомпозиции

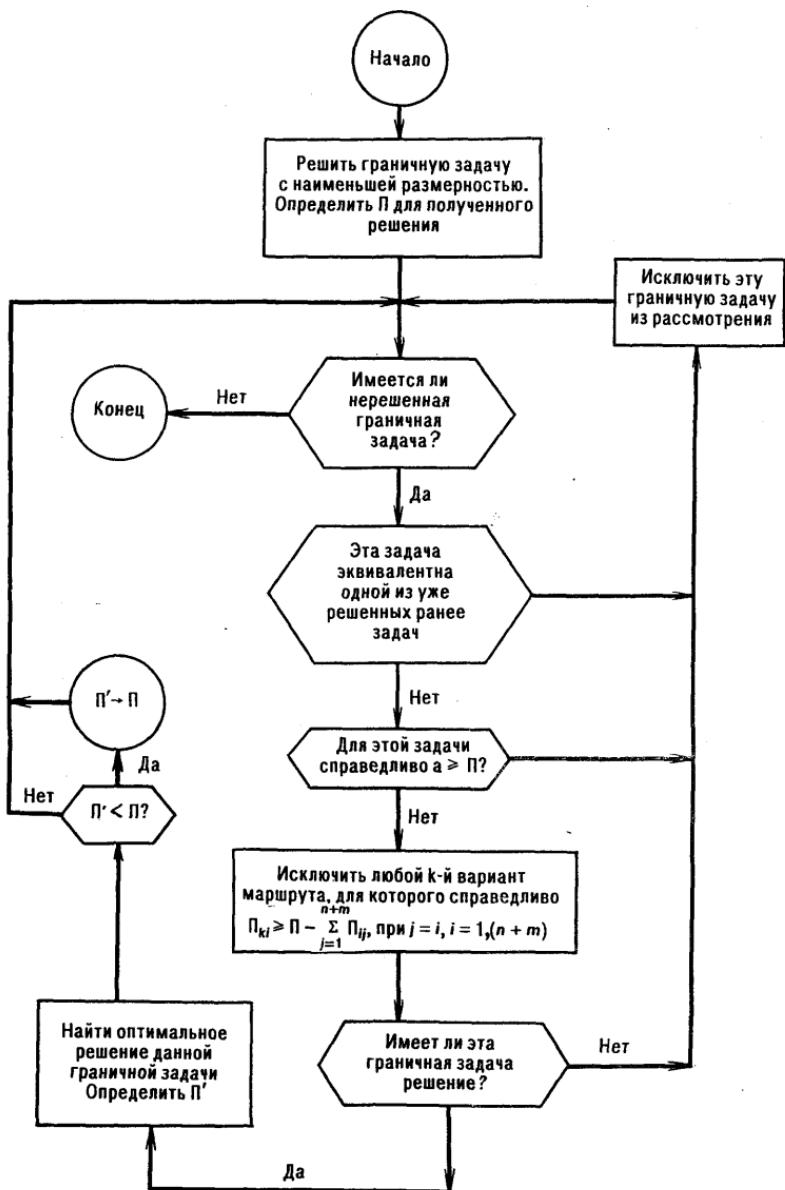


Рис. 9.8. Алгоритм решения полученного множества граничных задач синтеза теплообменных систем

Таблица 9.1. Параметры состояния технологических потоков

№ потока	$W, \text{ кг/ч}$	$t^u, ^\circ\text{C}$	$t^l, ^\circ\text{C}$	$c, \text{ кДж/(кг} \cdot \text{К)}$
$S_{M-1}$	12 600	160	95	25,14
$S_{M-2}$	11 360	260	140	33,62
$S_{N-3}$	9400	60	160	29,33
$S_{N-4}$	10 450	115	260	20,95

каждый узел которого соответствует одной из граничных задач. В процессе декомпозиции ГЗС  $\tilde{P}_j$  порождает совокупность  $w$  граничных задач следующего уровня декомпозиции, для которых

$$\bigcup_{i=1,w} E_{j-i} = E_j. \quad (9.12)$$

Уравнения (9.5)–(9.9) справедливы для граничных задач любого уровня декомпозиции ИЗС ( $P$ ). Получив оптимальное решение  $G_z^*$  граничной задачи  $\tilde{P}_z$ , можно исключить из рассмотрения любую граничную задачу  $\tilde{P}_j$ , если выполняется условие:

$$\Pi_z(G_z^*) \leq \Psi_j. \quad (9.13)$$

Третий этап состоит в определении технологической схемы, которая соответствует минимуму приведенных затрат, путем решения полученных ГЗС по алгоритму, блок-схема которого показана на рис. 9.8. Некоторое оптимальное решение одной из граничных задач, отвечающее условию (9.10), будет определять оптимальный вариант ИЗС.

Пример 9.1. Применить гранично-декомпозиционный метод решения ИЗС оптимальной ТС рекуперации тепла для четырех потоков: двух горячих ( $m = 1, 2$ ) и двух холодных ( $n = 3, 4$ ). Для каждого потока заданы его параметры состояния (табл. 9.1). Другие исходные данные, необходимые для решения ИЗС, сведены в табл. 9.2.

Решение. В данном случае набор ГЗС первого уровня декомпозиции  $P_1$  содержит 4 задачи (рис. 9.9). Граничные задачи приведены в табл. 9.3. В обозначении каждой граничной задачи в фигурных скобках указаны номера

Таблица 9.2. Исходные данные для синтеза оптимальной технологической схемы ТС

Проектные переменные	Величина
Коэффициенты теплопередачи, $\text{кДж}/(\text{м}^2 \cdot \text{ч} \cdot \text{К})$ :	
для процесса теплообмена между технологическими потоками	628,5
и при охлаждении водой ( $K_1$ и $K_2$ )	
при нагревании паром ( $K_3$ )	833
Минимально допустимый перепад температур ( $\Delta t$ ), $^\circ\text{C}$	10
Температура охлаждающей воды, $^\circ\text{C}$ :	
начальная ( $t_x^u$ )	40
наибольшая конечная ( $t_x^l$ )	80
Температура греющего пара ( $t_H$ ), $^\circ\text{C}$	282
Стоимость охлаждающей воды ( $\delta_x$ )	$7 \cdot 10^{-5}$
Стоимость греющего пара ( $\delta_H$ )	$2 \cdot 10^{-3}$
Коэффициенты стоимостной функции теплообменника $\mathbb{C} = af^b$ :	
$a$	43,04
$b$	0,88

Таблица 9.3. Набор граничных задач синтеза первого уровня декомпозиции

№ ис- ходного потока	Маршрут исходного потока	Приведенные затраты, руб./год	№ ис- ходного потока	Маршрут исходного потока	Приведенные затраты, руб./год
Задача I-1 {1,3}			Задача I-2 {1,4}		
1	[1,3]	84	1	[[1,4], 3]	84
2	[[2,4], (1,3)], X	2880		[1,4], X	4726
	[[2, (1,3)], 4], X	4283	2	[[2, (1,4)], 3]	104
	[2,4], X	5308		[[2,3], (1,4)], X	3781
	[2, (1,3)], X	12 347		[2,3], X	5089
	2, X	14 735		[2, (1,4)], X	7944
3	(2, (1,3))	53		[(2, [1,4], 3)], X	9741
	([2,4], (1,3))	137		2, X	14 735
	(1,3), H	7825	3	(2,3)	36
4	(2,4), H	5229		(2, [1,4], 3)	63
	([[2, (1,3)], 4], H	9708		([[2, (1,4)], 3], H	6079
	4H	35 233		([[1,4], 3]), H	16 076
				3H	30 560
Задача I-3 {2,3}			4	(2, (1,4)), H	5245
1	[1,4], X	4726		([[2,3, (1,4)], H	22 797
	1, X	7289		(1,4), H	27 044
2	[[2,3], 4], X	1158		Задача I-4 {2,4}	
	[[2,3], (1,4)], X	3781	1	[1,3]	84
	[2,3], X	5089		[1, ([2,4], 3)],	3966
3	2,3	36		1, X	7289
4	([[2,3], (1,4)], H	22 797	2	[[2,4], 3]	82
	([[2,3], 4], H	22 801		[[2,4], (1,3)], X	2880
	(1,4), H	27 044		[2,4], X	5308
	4, H	35 233	3	([[2,4, (1,3))	137
			4	((1, [2,4], 3)), H	3495
				(1,3), H	7825
				([[2,4], 3], H	14 308
				3, H	30 560
			4	(2,4), H	5229

Примечание. X – охлаждающая вода; H – грекующий пар; ( ) – холодный промежуточный (результатирующий) поток; [ ] – горячий промежуточный (результатирующий) поток; { } – граничная задача синтеза.

исходных потоков, определяющие операцию теплообмена, которая обязательно должна содержаться в решении данной задачи. С целью снижения размерности полученных ГЗС каждую задачу первого уровня декомпозируют на граничные задачи второго уровня. Так, ГЗС {1, 4} заменяем набором из четырех граничных задач второго уровня декомпозиции:

$$\{1, 4; 0\}, \{1, 4; 2, 3\}, \{[1, 4], 3; 1, 4\} \text{ и } \{2, (1, 4); 1, 4\}.$$

Эти граничные задачи представлены в табл. 9.4.

Таким образом, ГЗС первого уровня {1, 4} размерностью 16 вариантов маршрутов исходных технологических потоков декомпозирована на 4 задачи, каждая из которых имеет размерность меньшую, чем исходная граничная задача. Размерности этих граничных задач равны: 4, 7, 6 и 7 вариантов маршрутов. В результате декомпозиции граничной задачи {1, 4} число совокупностей

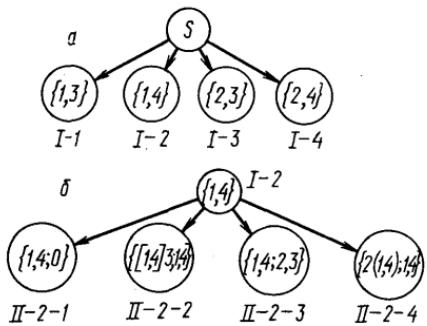


Рис. 9.9 Иерархическая (многоуровневая) декомпозиция исходной задачи синтеза ТС ( $n = 2, m = 2$ ):

*a*—первый этап декомпозиции; *b*—второй этап декомпозиции (на примере граничной задачи синтеза {1, 4})

Рис. 9.10. Операторная схема оптимальной теплообменной системы для исходной задачи синтеза ( $n = 2, m = 2$ ):

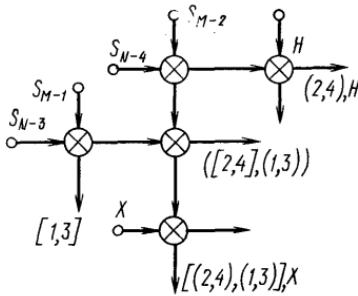
X—охлаждающая вода; H—гревущий пар

маршрутов исходных технологических потоков, которые необходимо рассмотреть для решения этой задачи, сократилось со 180 (задача {1,4}) до 21 (четыре задачи второго уровня декомпозиции). Для данной ИЗС размерность граничной задачи, образованной в соответствии с ранее описанной методикой, содержащей все варианты маршрутов исходных потоков, составила бы 34 варианта маршрутов. В рассматриваемом случае любая ГЗС второго уровня легко может быть решена простым перебором содержащихся в ней вариантов искомой технологической схемы ТС.

В результате синтеза была определена оптимальная технологическая схема ТС (рис. 9.10).

Таблица 9.4. Граничные задачи синтеза второго уровня декомпозиции, полученные из задачи {1,4}

№ ис- ходного потока	Маршрут исходного потока	Приведенные затраты, руб./год	№ ис- ходного потока	Маршрут исходного потока	Приведенные затраты, руб./год
<i>Задача II-2-1 {1,4; 0}</i>					
1	[1,4], X	4726	1	[1,4], X	84
2	2, X	14 735			
3	3, H	30 560	2	[2, ([1,4], 3)], X	9741
4	(1,4), H	27 044		2, X	14 735
<i>Задача II-2-2 {[1,4], 3; 1,4}</i>					
1	[1,4], X	4726	1	[1,4], X	4726
2	[[1,4], 3], X	3781			
	[2, (1,4)], X		2	[2, ([1,4], 3)], X	
	[2,3], X	5089		2, X	
3	(2,3)	36	3	(2, [1,4], 3))	63
4	([2,3], (1,4)), H	22 797		([1,4], 3), H	16 076
	(1,4), H	27 044	4	(1,4), H	27 044
<i>Задача II-2-3 {1,4; 2,3}</i>					
1	[1,4], X	4726	1	[1,4], X	4726
2	[[2,3], (1,4)], X	3781	2	[[2, (1,4)], 3]	104
	[2,3], X	5089		[2, (1,4)], X	7944
3	(2,3)	36	3	([2, (1,4)], 3), H	6079
4	([2,3], (1,4)), H	22 797		3, H	30 560
	(1,4), H	27 044	4	(2, 1,4), H	5245
				(1,4), H	27 044
<i>Задача II-2-4 {2 (1,4); 1,4}</i>					



Декомпозиционно-эвристический метод синтеза ХТС базируется на применении декомпозиционных принципов синтеза ХТС. Каждая элементарная задача синтеза ТС при генерации решения представляет собой задачу осуществления в одном ТА операции теплообмена между  $i$ -м и  $j$ -м исходными или промежуточными потоками из имеющегося множества потоков  $B$ . Указанные потоки выбраны в соответствии с одной из эвристик, входящих в составленный на основе термодинамического анализа процессов теплообмена набор эвристик ЭП-1–ЭП-7: «Для заданной величины рекуперируемого тепла исходных потоков – последовательно выбирать варианты теплообмена»:

ЭП-1) между самым высокотемпературным из горячих и холодных потоков;

ЭП-2)  $\forall i: t_{r-i}^h = \max_k t_k^h (k = \overline{1, m}), \forall j: t_{x-j}^h = \max_v t_v^h (v = \overline{1, n});$

ЭП-3) если для энталпий  $Q_{x-j} < Q_{r-i}$ , а для  $t_{r-i}^h \geq t_{x-j}^h$ ,  $t_{r-i}^k \ll t_{x-j}^k$ ,  $(t_{r-i}^h - t_{x-j}^k) > \Delta t_{\min}^*$ , то  $j$ -й поток должен обмениваться теплом с высокотемпературной частью  $i$ -го потока;

ЭП-4)  $Q_{\max_{ij}} = \max_b Q_{\max_{ij}}(b)$  при  $b \in B$ ;

ЭП-5) образуются такие новые результирующие потоки, что  $\Pi_{\text{рез}}^g = \min_b \Pi_{\text{рез}}^g$ , при  $b \in B$ , где  $\Pi_{\text{рез}}^g$  – затраты на изменение энталпии новых потоков с помощью вспомогательных теплоносителей для достижения этими потоками  $t_{r(x)}^k$ ;

ЭП-6)  $\Pi_{ij}^g = \max_{(i,j), r} \Pi_{(i,j), r}$  при  $r = \overline{1, R}$ , где  $\Pi_{ij}^g$  – затраты на изменение энталпии  $i$ -го и  $j$ -го потоков, обусловлено использованием теплоносителей для достижения  $t_{r(x)}^k$ ;

ЭП-7) произвольно из множества  $B$ .

Процесс обучения выбору оптимальной стратегии декомпозиции ИЗС путем использования наилучших эвристик с учетом значений их весовых коэффициентов (см. раздел 8.5.3) осуществляется после трех попыток синтеза. Оптимальной структурой синтезируемой ТС считают такую структуру  $G^*$ , при которой ЭП ( $G^*$ ):  $[\Pi(G^*) < \Pi(G_i)]$ , где  $i = \overline{1, N}$  при  $N = 150$ .

Топологический метод синтеза ТС базируется на применении ДП-принципа и ИГ-принципа синтеза ХТС, которые позволяют математически формализовать постановку ИЗС ресурсосберегающих ТС как задачу оптимального назначения (ЗОН). Указанная ЗОН отображается с использованием топологической модели ТС в виде двудольного теплового графа (ДТГ).

При формализации ИЗС как ЗОН применяются прежде всего указанные ранее технологические предпосылки, а также две дополнительные предпосылки:

каждый вариант ТС синтезирует на основе использования теории элементарной декомпозиции ИЗС (см. раздел 8.4.2);

для разработки структуры любого варианта ТС энталпии каждого исходного потока поставлена в соответствие совокупность энталпий нового набора потоков – начального и конечного, промежуточных и дополнительных. Эти наборы потоков назначаются для участия в теплообмене. При этом количество тепла, максимально передаваемого в каждом теплообменнике, одинаково и равно:  $Q_{\max} = Q^* = \min(Q_1, \dots, Q_p, \dots, Q_{m+n})$ , где  $k = 1, (m+n)$ ,  $Q_p = W_p c_p (t_p^h - t_p^c)$ .

Параметры состояния  $v$ -го промежуточного потока: энталпия  $Q^*$ , «конечные» температуры (при  $v \geq 2$ ):  $t_{i(v)}^k = t_i - vQ^*/W_i c_i$ ,  $t_{j(v)}^k = t_j^h + vQ^*/W_j c_j$ , где  $W_i$  – массовый расход,  $c_i$  – теплоемкость  $i$  ( $j$ ) исходных потоков.

Математическая постановка задачи синтеза ТС как ЗОН имеет следующий вид: необходимо определить:

$$\Pi^* = \min \sum_{i,j} \sum_i \Pi_{ij} x_{ij}$$

при наличии ограничений

$$\sum_i \sum_j x_{ij} = \min(M, N);$$

$$x_{ij} = (0, 1); \quad \sum_i x_{ij} \leq 1; \quad \sum_j x_{ij} \leq 1,$$

где  $\Pi^*(\Pi_{ij})$  – оптимум (некоторое значение) КЭ для ТС в целом (для теплообменника);  $i = 1, M$  ( $j = 1, N$ ) – число «горячих» («холодных») потоков, включая потоки вспомогательных теплоносителей, которые могут ( $x_{ij} = 1$ ) или не могут ( $x_{ij} = 0$ ) участвовать в теплообмене;  $[X]$  – матрица назначений пар потоков для участия в теплообмене.

Значение  $\Pi_{ij}$  вычисляется с использованием библиотеки модулей расчета процессов теплообмена:

$$\Pi_{ij} = \Pi_{ij} \{gF_{ij}^b(h_{ij}, Q^*, \Delta T); \mathcal{Z}_s\},$$

где  $F_{ij}$  – площадь поверхности теплообменника;  $[A] = [a_{ij}] = [\Pi_{ij} x_{ij}]$  – матрица оценок назначений;  $a_{ij} = \infty$ , если теплообмен физически нереализуем;  $a > 0$ ;  $0 < b < 1$ .

Матрица  $[X]$  представляет собой матрицу смежности ДТГ, отображающего гипотетическую обобщенную технологическую структуру ТС. Дугам ДТГ соответствуют параметры  $\Pi_{ij}$ , а вершинам – энталпии «горячих» и «холодных» потоков.

На основе указанной математической постановки ИЗС процедура поиска оптимальной ТС представляет собой процедуру поиска максимального паросочетания ДТГ. *Паросочетание двудольного графа* – это такое множество его дуг, в котором никакие две дуги не смежны. *Максимальное паросочетание двудольного графа* – это такое паросочетание, в которое входит максимально возможное число дуг графа.

Максимальное паросочетание ДТГ отображается насыщенной матрицей назначения, представляющей собой подматрицу матрицы назначений  $[X]$ , в каждой строке и в каждом столбце которой содержится только один ненулевой элемент.

Таким образом, оптимальной структуре синтезируемой ТС будет соответствовать максимальное паросочетание ДТГ, отображающее структуру ТС, в которой все исходные и результирующие потоки ТС участвуют в теплообмене только один раз, и величина приведенных затрат на всю ТС минимальна.

#### 9.4 ПОСТАНОВКА ИСХОДНЫХ ЗАДАЧ СИНТЕЗА РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ СИСТЕМ РЕКТИФИКАЦИИ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ СМЕСЕЙ

Для заданных значений параметров свойств и состояний исходной идеальной или неидеальной зеотропной  $N$ -компонентной смеси, заданных простых ректификационных колонн (РК) необходимо определить структуру технологической схемы ациклической системы ректификации (ACP), параметры технологических потоков, а также технологические и конструкционные параметры колонн, которые обеспечивают выделение  $N$  целевых однокомпонентных продуктов требуемого качества при минимуме приведенных затрат на систему.

При поиске оптимального решения указанной задачи синтеза оптимальных АСР используются следующие физико-химические и инженерно-технологические предпосылки:

Р1) на основе анализа физико-химических свойств компонентов идеальной или неидеальной зеотропной многокомпонентной смеси (МКС) ранжируют компоненты в порядке уменьшения их летучести или в порядке увеличения их температур кипения, что позволяет определить составы верхних и нижних потоков РК. Изменения давления в колоннах не приводят к изменению порядка компонентов ранжированного списка компонентов смеси;

Р2) каждая точка деления ранжированного списка компонентов смеси соответствует процессу бинарного разделения некоторой МКС в простой РК, имеющей один входной и два выходных технологических потока;

Р3) каждый альтернативный вариант технологической схемы АСР будет отображаться набором точек деления. Каждая точка деления определяет процесс бинарного разделения в одной простой РК некоторой зеотропной смеси на подмножества МКС меньшей размерности и совпадает с номером легкого ключевого компонента в ранжированном списке компонентов смеси.

Формализованная постановка ИЗС оптимальных АСР имеет следующий вид:

Дано:

$$P = \{I(N), \mathcal{K}, g, \bar{X}, \bar{Y}, \bar{S}^*, \bar{A}, V, \Pi\}. \quad (9.14)$$

Необходимо определить:  $G$ ,  $\mathcal{K}$ ,  $\bar{D}$ ,  $\bar{Z}$ , при которых  $\Pi^* = \min(G, \mathcal{K}, \bar{D}, \bar{Z})$ ,

где  $I(N)$  – ранжированный список  $N$  компонентов исходной смеси в порядке уменьшения их летучести;  $g$  – технологическая операция ректификации;  $V$  – параметры окружающей среды;  $\bar{A}$  – современный уровень инженерно-аппаратурного оформления процесса ректификации;  $\mathcal{K}$  ( $D$ ) – концентрационные (технологические) параметры колонн;  $\bar{Z}$  – параметры промежуточных потоков системы;  $\bar{S}^*$  – желаемые значения характеристик некоторых свойств функционирования системы (надежность, устойчивость и т. д.);  $G$  – технологическая структура, или топология системы;  $\Pi$  – величина приведенных затрат системы.

Каждую технологическую операцию разделения смеси  $g_j$  на  $j$ -м этапе декомпозиции ИЗС можно представить следующим образом:

$$g_j = \{i, j, r\}, \quad (9.15)$$

где  $i$  – номер положения точки деления, расположенный между  $(i-1)$ -м и  $i$ -м ключевыми компонентами исходной смеси ( $i = 2, N$ );  $r$  – вариант разделения ( $r = 1$  – простая колонна).

Множество АСР  $G$  определяют как совокупность технологических операций разделения  $g_j$ , полученных в результате декомпозиции ИЗС:

$$G = \bigcup_{j=1,s} g_j = \bigcup_{j=1,s} \{i, j, r\}, \quad (9.16)$$

где  $s$  – общее число уровней декомпозиции ИЗС.

Каждая синтезированная АСР характеризуется некоторой величиной КЭ в виде приведенных затрат  $\Pi(G)$ :

$$\psi\{P\} \rightarrow \Pi(G) = \sum_{j=1,s} \Pi_j(g_j), \quad (9.17)$$

где  $\Pi_j(g_j)$  – величина приведенных затрат для отдельной колонны, определяемая с помощью модулей расчета колонн.

Сформулируем необходимые условия возможности решения ИЗС  $P$  на основе декомпозиционно-поискового принципа синтеза ХТС (см. раздел 8.4):

- 1)  $P \notin R$ , где  $R$  – элементарная задача синтеза;
- 2)  $\{P\} = \bigcup P_i$ , где  $\{P\}$  – множество альтернативных решений ИЗС;  $P_i$  – элементарная или произвольная задача;  $i \geq 2$  – число альтернативных решений задачи синтеза;
- 3) критерий  $\psi \rightarrow \Pi(G)$ , вычисляемый на множестве решений ИЗС, имеет аддитивно-сепарабельную, или декомпозиционную форму

$$\psi(P_i \in \{P\}) \rightarrow \Pi(G) = \begin{cases} \sum_j \Pi_j(g_{j-i}) & \text{при } G_i = \bigcup_j g_{j-i}; \quad g_{j-i} \subset R; \\ \sum_k \Pi_k(G_{k-j}) & \text{при } G_i = \bigcup_k G_{k-j}; \quad P_{k-j} \cap S_{k-j} \neq \emptyset; \quad G_{k-j} \notin R, \end{cases}$$

где  $j$ -этап декомпозиции либо задачи  $P_{k-j}$ , либо подзадачи  $S_{k-j}$ ;  $i(K)$ -номер элементарной (произвольной) подзадачи синтеза  $S_{k-i}$ .

Тогда математическую формулировку задачи поиска оптимального решения ИЗС ациклических систем ректификации можно представить следующим образом:

$$\Pi(G) \rightarrow \Pi^*(G^*) = \min_{g_j \in \{G_i\}} \sum_{j=1, J} \Pi_j(g_j) \quad (9.18)$$

$$\text{при ограничении } \Pi^*(G^*) \leq \Pi_i(G_i) \leq \Pi^*(G^*)\beta, \quad (9.19)$$

где  $G_i$ -множество квазиоптимальных технологических схем АСР;  $\beta$ -коэффициент квазиоптимальности ( $1 < \beta \leq 1,3$ );  $\Pi_j(g_j)$ -величина локального КЭ в виде приведенных затрат для отдельной колонны.

Ограничение (9.19) позволяет определять множество перспективных или квазиоптимальных технологических схем СР, а также компенсировать влияние на результат решения ИЗС неполноты априорной информации о физико-химических константах и о стохастических внешних воздействиях на синтезируемую систему.

При поиске оптимальной АСР необходимо учитывать ограничения для физической реализуемости технологической операции разделения МКС в каждом аппарате. Ограничения на количество выделения целевых продуктов в потоках дистиллята  $D$  и кубовой жидкости  $W$  имеют следующий вид:

$$z_D \leq \varepsilon_1; \quad z_W \leq \varepsilon_2, \quad (9.20)$$

где  $z_D, z_W$  ( $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ ) - действительная (допустимая) величина содержания примесей в потоках дистиллята  $D$  и кубовой жидкости  $W$ .

Ограничение, определяющее эффективность процесса ректификации вследствие различной упругости паровой фазы ключевых компонентов, можно представить следующим образом:

$$P_i/P_{i+1} \geq \alpha_{\min}, \quad (9.21)$$

где  $\alpha_{\min}$  ( $P_i$  и  $P_{i+1}$ ) - минимальная величина коэффициента относительной летучести (упругости паровой фазы) легкого и тяжелого ключевых компонентов.

Если ограничения для физической реализуемости процесса ректификации (9.20) и (9.21) не выполняются, то необходимо выбрать другой типовой процесс разделения, например процесс экстракции вместо процесса ректификации.

Задача синтеза оптимальных технологических схем систем разделения идеальных и неидеальных зеотропных многокомпонентных смесей (МКС) неоднократно возникает при разработке технологических схем различных функциональных подсистем химических, нефтехимических и нефтеперерабатывающих производств: подсистем очистки (подготовки) сырья, подсистем очистки (выделения) продуктов, подсистем очистки сточных вод, подсистем выделения определенных компонентов для их дальнейшего использования в производстве целевых продуктов и т. д.

Если учесть также неоднородность схемы СР в смысле использования в общей схеме элементов с различными конструк-

ционными решениями, то количество возможных схем СР становится огромным. Так, при разделении смеси  $N$  идеальных и неидеальных зеотропных компонентов на чистые компоненты, если не допускается использование каких-либо разделяющих агентов, число возможных схем АСР равно:

$$T = [2(N - 1)]!/[N!(N - 1)!], \quad (9.22)$$

и для разделения смеси  $N = 7$  компонентов тогда возможны 132 различные схемы АСР.

Если же учесть возможность использования различных типовых процессов разделения, число которых равно  $S$ , то число возможных схем СР равно:

$$\bar{T} = \{[2(N - 1)]!/[N!(N - 1)!]\} \times S^{N-1}. \quad (9.23)$$

На рис. 9.11 показано дерево вариантов решения задачи синтеза системы разделения зеотропной пятикомпонентной смеси ( $A, B, C, D, E$ ); на рис. 9.12,  $a$ – $\sigma$  изображены три структурные схемы обычных ректификационных систем разделения этой смеси.

При поиске оптимальных решений исходных задач синтеза СР введем следующее обозначение некоторых ГЗС  $\{i\}$ , где  $i$  – номер точки деления в ранжированном исходном списке МКС. ГЗС

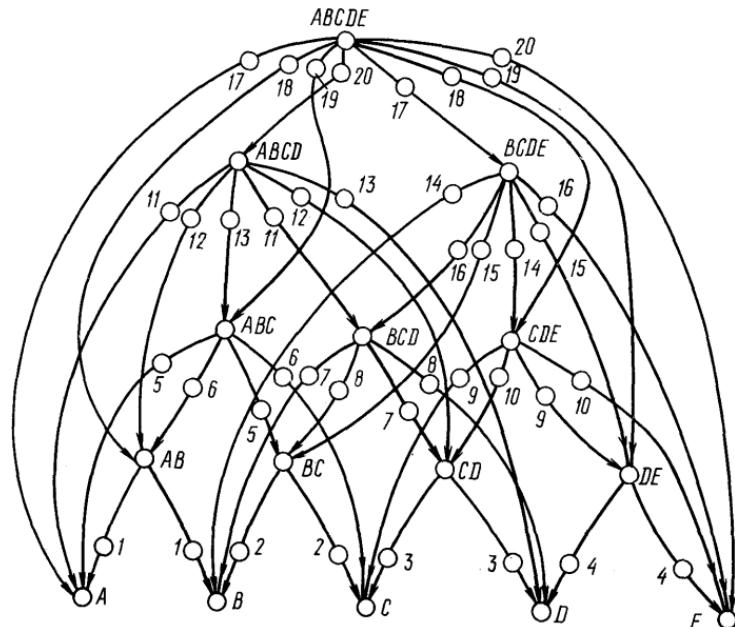


Рис. 9.11. Дерево вариантов решения задачи синтеза системы разделения зеотропной пятикомпонентной смеси ( $A, B, C, D, E$ ) на основе ранжированного списка компонентов. Один и тот же номер на двух дугах дерева указывает, что эта пара дуг отображает один типовой технологический оператор разделения (один типовой процесс разделения)

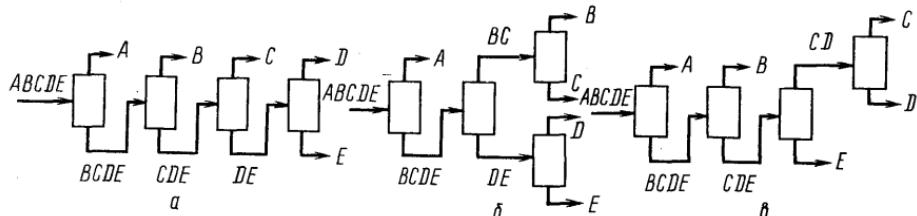


Рис. 9.12. Структурные схемы трех из 14 возможных обычных ректификационных систем разделения зеотропной пятикомпонентной смеси ( $A, B, C, D, E$ ) с использованием для проведения процессов разделения только одного физико-химического свойства компонентов (летучести)

$\{i\}$  – это такая задача, решением которой является множество всех технологических схем СР, содержащих колонну ректификации, где происходит разделение исходной или промежуточной зеотропной МКС по точке деления  $i$ .

Пример 9.2. Для заданной зеотропной пятикомпонентной смеси ( $A_1, B_2, C_3, D_4, E$ ), ранжированной в порядке увеличения температур кипения, (нижний индекс  $i = 1, 4$  – номер точки деления), определить: 1) число возможных вариантов технологических схем СР, если число типовых операторов разделения  $S = 3$ ; 2) вариант технологической схемы СР в соответствии с эвристическим правилом: «первым осуществлять разделение по положению  $i$ -й точки деления, для которой

$$\left| 1 - \left( \sum_{r=1,i} G_r / \sum_{r=i+1,N} G_r \right) \right| = \min_i, \quad i = 1, N-1,$$

где  $G_r$  – массовый расход  $r$ -го компонента. Ниже представлены массовые расходы компонентов заданной пятикомпонентной смеси:

Компоненты . . . . .	$A$	$B$	$C$	$D$	$E$
Точки деления $i$ . . . . .	(1)	(2)	(3)	(4)	
Количество, кг/ч . . . . .	100	150	200	50	50

3) построить дерево вариантов решения ГЗС- $\{2\}$ , где  $\{2\}$  означает множество технологических схем, в которых обязательно наличие колонны для разделения исходных или промежуточных МКС по 2-й точке деления.

Решение. Число возможных вариантов технологической схемы СР определяют по формуле (9.23)

$$T = [2(5-1)!/5!(5-1)!] \times 3^{5-1} = 1134.$$

Определим последовательность расположения  $i$ -х точек деления МКС в соответствии с заданным эвристическим правилом:

$$\text{для } i = 1 | 1 - 100/(150 + 300) | = 0,78;$$

$$\text{для } i = 2 | 1 - 250/(200 + 100) | = 0,17;$$

$$\text{для } i = 3 | 1 - 450/100 | = 5,5;$$

$$\text{для } i = 4 | 1 - 500/50 | = 9.$$

Таким образом, получена следующая схема СР, последовательность точек деления в которой: 2, 1, 3, 4. На рис. 9.13 представлена структурная схема полученного варианта технологической схемы СР, а на рис. 9.14 – дерево вариантов решения для ГЗС- $\{2\}$ .

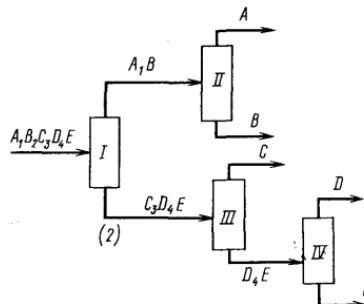


Рис. 9.13. Структурная схема синтезированного варианта технологической схемы СР для последовательности точек деления зеотропной МКС 2, 1, 3, 4 элемент I соответствует точке деления (2), элемент II-(1), III-(3), IV-(4)

Рис. 9.14. Дерево декомпозиции решений ГЗС-{2}, где 2-номер точки деления исходного ранжированного списка зеотропной МКС; «И»—оператор для пары дуг, отображающих одну простую РК

**Пример 9.3.** Для заданной исходной зеотропной смеси углеводородов, содержащей пять фракций: 1—метан-водородную; 2—этан-этиленовую; 3—пропан-пропиленовую; 4—бутан-бутиленовую; 5—фракцию  $C_5-C_6$ , необходимо:  
1) построить дерево вариантов решений для ГЗС-{1}; 2) определить оптимальную технологическую схему СР пятикомпонентной смеси в соответствии с минимумом приведенных затрат  $\Pi^*(G^*) = \min \sum \Pi_j(g_j)$  для ГЗС-{1}. Приведенные затраты  $\bar{\Pi}_j$  на функционирование типового оператора разделения (ТОР) —  $g_j$  определяются по формуле  $\Pi_i(g_i) = \Pi_0 \beta_{ii}$ , где  $i$ —номер точки деления в исходном

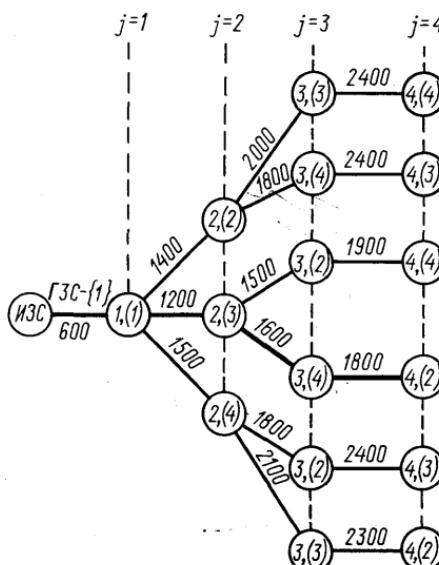
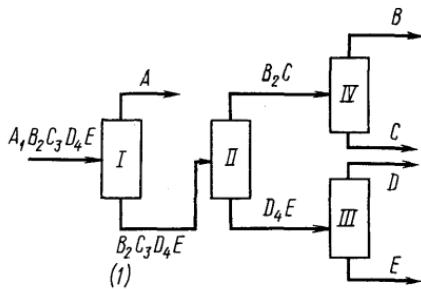


Рис. 9.15. Дерево вариантов решений ИЗС синтеза СР пятикомпонентной смеси для ГЗС-{1};  $j$ ,  $i$ -номер вершины;  $j$ -номер этапа декомпозиции ИЗС;  $i$ -номер точки деления

Рис. 9.16. Структурная схема оптимальной СР пятикомпонентной смеси для ГЗС-{1} – исходный список ранжирования зеотропной МКС ( $A_1$   $B_2$   $C_3$   $D_4$   $E$ ):

I–IV – типовые операторы разделения (ТОР); 1–4 – точки деления



ранжированном списке компонентов;  $j$  – номер этапа декомпозиции ИЗС;  $\Pi_0^* = 200$ ; матрица весовых коэффициентов имеет вид:

$$[\beta_{j,i}] = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 0,5 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 4 & 1,5 & 1 \\ 3 & 1 & 3 & 3 & 3 \\ 4 & 0,5 & 4,5 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

*Решение.* На рис. 9.15 изображено дерево вариантов решений (ДВР) для ГЗС-{1}. Каждая ветвь ДВР отображает некоторый ТОР, а цепь, выходящая из вершины-корня ДВР, соответствует либо технологической топологии синтезируемой СР, либо некоторой ее подсистеме (фрагменту) СР.

Каждая вершина ДВР обозначена последовательностью двух чисел  $j, i$ , где  $j$  – номер этапа декомпозиции ИЗС, а  $i$  – номер точки деления. Цепь ДВР, соответствующая искомой оптимальной технологической схеме, выделена жирной линией. На ветвях ДВР показаны значения приведенных затрат, соответствующие различным фрагментам, или завершенным технологическим схемам синтезируемой СР.

На рис. 9.16 показана структурная схема оптимального варианта СР для ГЗС-{1}.

Необходимо отметить, что в этой книге не рассматриваются методы решения ИЗС оптимальных неоднородных систем ректификации азеотропных МКС, которые базируются на использовании декомпозиционных принципов синтеза ХТС и термодинамико-топологического метода анализа структуры концентрационного пространства компонентов МКС в виде диаграмм фазового равновесия для выбора различных массообменных процессов и сложных колонн ректификации.

## 9.5. ДЕКОМПОЗИЦИОННЫЕ МЕТОДЫ СИНТЕЗА ОПТИМАЛЬНЫХ АЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ РЕКТИФИКАЦИИ

Декомпозиционные методы синтеза оптимальных АСР, которые базируются на использовании ДП- и ЭД-принципов синтеза ХТС (см. разд. 8.4 и 8.5), включают следующие основные этапы:

1) декомпозиция ИЗС на совокупность подзадач меньшей размерности, достигаемая выбором различных положений точек деления исходной МКС, которые соответствуют отдельным РК;

2) проверка условий физической реализуемости процесса ректификации и определение значений технологических и конструкционных параметров, а также величины приведенных затрат для отдельных колонн;

3) выбор оптимальной СР, основанный на решении некоторой экстремальной задачи.

Разработаны следующие методы синтеза ациклических СР, базирующиеся на декомпозиционных принципах синтеза химико-технологической системы: 1) декомпозиционно-топологический; 2) декомпозиционно-эвристический; 3) метод динамического программирования.

Указанные методы реализуют различные процедуры декомпозиции ИЗС на подзадачи меньшей размерности и поиска оптимального решения ИЗС с применением топологических моделей в виде деревьев декомпозиции задач синтеза и деревьев декомпозиции решений задач синтеза (см. раздел 8.8).

Следует отметить, что декомпозиционно-топологический и декомпозиционно-эвристический методы синтеза оптимальной СР в отличие от метода динамического программирования позволяют значительно сократить число перебираемых решений ИЗС в виде отдельных колонн или фрагментов СР, поскольку исключаются из рассмотрения бесперспективные варианты технологических схем.

Практическая реализация декомпозиционных процедур поиска оптимальных решений задач синтеза СР достигается, во-первых, декомпозицией ИЗС и декомпозицией множества решений ИЗС, во-вторых, применением упорядоченного ограниченного перебора множества решений ИЗС (см. раздел 8.8).

Рассмотрим сущность процедур декомпозиции ИЗС и декомпозиции множества решений ИЗС. Выделим две процедуры декомпозиции исходных задач синтеза (ИЗС) СР: процедуру элементарной декомпозиции и процедуру произвольной декомпозиции (см. раздел 8.4). При элементарной декомпозиции ИЗС- $P$ , по крайней мере, одна из подзадач  $S_i$  является элементарной задачей синтеза (ЭЗС)  $R$ , которая характеризуется списком целых чисел  $\{i\}$ , где  $i$  – номер положения точки деления, расположенной между  $(i-1)$ -м и  $i$ -м ключевыми компонентами исходной смеси ( $i = 2, N$ ). Каждая ЭЗС имеет тривиальное решение в виде одной РК, обеспечивающей выделение либо одного целевого продукта, либо разделение некоторой бинарной смеси.

При использовании процедуры произвольной декомпозиции ИЗС множество параметров  $P$  декомпозируется введением дополнительного множества переменных декомпозиции  $T_q$  на совокупность взаимосвязанных подзадач  $S_1, S_2, \dots, S_q$ , каждая из которых является произвольной задачей синтеза (ПЗС).

Постановка каждой подзадачи  $S_q = \{I(N-r), T_q\}$  соответст-

вует задаче синтеза фрагмента СР для разделения меньшего по числу компонентов ранжированных смесей  $I(N-r)$ , где  $r = 1, (N-2)$ ;  $T_q$  – множество параметров состояния и свойств продуктовых потоков фрагмента системы ректификации. Каждой ПЗС соответствует определенное или реализуемое решение в виде фрагмента технологической схемы СР.

Кратко рассмотрим сущность декомпозиционно-топологического метода синтеза оптимальных систем ректификации, использующих только внешние теплоносители.

Декомпозиционно-топологический метод включает следующие этапы:

1) определение исходной верхней граничной оценки КЭ системы ректификации в виде приведенных затрат, соответствующих некоторому перспективному «хорошему» решению ИЗС;

2) построение ДВР задачи синтеза и одновременный упорядоченный поиск оптимального решения или множества квазиоптимальных решений ИЗС на дереве вариантов, для которых величина приведенных затрат  $\Pi$  равна  $\bar{\psi} \leq \Pi < \beta\psi$ , где  $1 < \beta \leq 1,3$  – коэффициент квазиоптимальности;  $\psi$  – верхняя граничная оценка КЭ функционирования системы ректификации.

На первом этапе для определения исходной верхней граничной оценки КЭ  $\bar{\psi}$  получают «хорошее» приближенное решение ИЗС  $G''$ , используя при создании схемы эвристическое правило, например, выделение легколетучего компонента в первую очередь. Верхней граничной оценке задают исходное значение  $\Pi(G'')$ . На данном этапе определяют диапазон изменения величины КЭ  $(\bar{\psi}, \beta\bar{\psi})$ .

На втором этапе при построении ДВР каждой вершине соответствует отдельная РК, обеспечивающая разделение смеси на легкие и тяжелые потоки дистиллята и кубовой жидкости требуемого качества. Цепь дерева от исходной до промежуточной вершины соответствует фрагменту СР, а цепь дерева от исходной до висячей (результирующей) вершины соответствует всей СР.

Перспективно-отсекающая декомпозиция решений ИЗС на дереве реализуется в результате сравнения НГ и ВГ для критерия эффективности. НГ – это текущее значение величины ПЗ на функционирование подсистем или СР в целом. ВГ представляет собой значение ПЗ для некоторой существовавшей или синтезированной ранее перспективной или квазиоптимальной системы ректификации  $\{P_n\} \subset \{E\}$ . Если на некотором уровне декомпозиции решений ИЗС получим, что  $\text{НГ} > \text{ВГ}$  для некоторой подсистемы ректификации, то данная подсистема должна быть отброшена как неоптимальная или неперспективная. Если  $\text{НГ} \leq \text{ВГ}$ , то данная подсистема является перспективной, и поиск оптимальной технологической схемы СР необходимо продолжить;

3) завершение упорядоченного ограниченного перебора решений или выбор оптимальной системы ректификации. Этот шаг представляет собой прекращение перебора  $G_1, G_2, \dots, G_k$  и определение такого реализуемого решения  $G^*$ , для которого характерно следующее соотношение:

$$\Pi(G^*) \leq \inf[\Pi_1(G_1), \Pi_2(G_2), \dots, \Pi_k(G_k)], \quad (9.24)$$

где  $\Pi_1(G_1), \Pi_2(G_2), \dots, \Pi_k(G_k)$  – значения затрат для квазиоптимальных систем ректификации  $G_1, G_2, \dots, G_k$ .

Завершение поиска  $G^*$  означает, что рассмотрены все варианты системы ректификации  $\{G_i\}$ , ( $i = 1, k$ ), для которых значения  $\Pi(G_i) \leq \Pi^*(G^*) \times \beta$ , и не существует никакой другой системы ректификации  $\{G_i\}$  ( $i = (k + 1), V$ , где  $V$  – общее число возможных вариантов систем с лучшими технико-экономическими показателями).

В основу декомпозиционно-эвристического метода синтеза систем ректификации положено использование наборов ЭП предпочтения для выбора стратегии декомпозиции с использованием принципов адаптации. На каждом этапе синтеза СР с применением декомпозиционно-эвристического метода одновременно осуществляются две стадии:

1) стадия эвристического синтеза подсистем ректификации на основе набора ЭП для выбора положения точки деления в ранжированном списке МКС;

2) стадия обучения выбору оптимальной стратегии декомпозиции ИЗС в соответствии с величиной приведенных затрат на проведение процесса ректификации МКС.

Для реализации элементарной декомпозиции ИЗС на каждом шаге поиска решения используется следующее множество ЭП:

ЭП-Р1) в первую очередь предпочтение отдается «прямой» последовательности схемы системы ректификации, в которой каждый продукт выделяется в виде легкого продукта;

ЭП-Р2) компонент, количество которого существенно превышает количество всех остальных компонентов исходной смеси, должен отбираться первым в общей последовательности колонн ректификаций;

ЭП-Р3) процесс ректификации наиболее трудноразделимой пары компонентов или наиболее трудноразделимых фракций должен проводиться последним в общей последовательности колонн ректификации;

ЭП-Р4) наиболее «агрессивный» по воздействию на аппаратуру компонент должен выводиться из системы ректификации в первую очередь.

Метод синтеза оптимальных технологических схем АСР с применением динамического программирования включает следующие этапы:

1) декомпозицию ИЗС систем ректификации на множество ГЗС простым перебором различных положений точки деления, обеспечивающей разбиение исходной МКС, состоящей из  $N$  компонентов, на различные продуктовые группы меньшей размерности с числом компонентов от  $(N - 1)$  до 2;

2) поиск оптимальной структуры системы ректификации МКС с применением динамического программирования.

Сущность этого метода состоит в том, что различные структуры АСР последовательно синтезируются, начиная с выбора колонн, в которых образуются бинарные продуктовые группы компонентов, входящих в исходную МКС, и постепенно переходя к колоннам, образующим все большие группы с учетом уже найденных структур подсистем для меньших групп.

Сначала выбирается бинарная смесь, разделение которой реализуется при минимальных затратах. Далее рассматриваются тройные смеси и определяется наиболее экономичный метод разделения, обеспечивающий получение бинарной смеси и некоторого чистого компонента. Суммируя стоимости разделения бинарной и тройной смесей, определяют общую стоимость этих этапов разделения.

Например, смесь  $ABC$  может быть разделена двумя различными способами. В одном случае получим поток компонента  $A$  и фракцию  $BC$ , в другом – фракцию  $AB$  и компонент  $C$ . Оптимальность способа разделения смеси  $ABC$  зависит от соотношения стоимости разделения на  $A$  и  $BC$  плюс стоимость разделения на  $B$  и  $C$  и стоимости разделения смеси  $ABC$  на  $AB$  и  $C$  плюс стоимость разделения на  $A$  и  $B$ . При таком расчете стоимости процессов разделения каждой из фракций оказывается возможным определить стоимость реализации всех альтернативных схем РКС для разделения исходной смеси при обеспечении гарантии определения оптимального варианта схемы в рамках используемых допущений.

Рассмотрим обычную СР, состоящую из простых РК, при одинаковом давлении в колоннах, а также одинаковых условиях подачи сырья в каждую колонну (например, при температуре кипения жидкости) и подвода тепла и холода (например, парциальный кипятильник и полный дефлегмататор). Пусть, кроме того, смесь зеотропна и исходная информация включает требования к количеству легких и тяжелых примесей в каждом продукте.

Условие  $\min$  флегмового числа отдельных РК, характерное для обычных СР, приводит к тому, что каждый компонент может быть тяжелым (или легким) ключевым компонентом не более чем для одной колонны. Это позволяет упорядочить все потенциальные РК, которые могут входить в любую схему СР данной  $N$ -компонентной смеси.

Пусть  $N$ -компонентная смесь заданного состава должна быть разделена обычной СР на  $N$  продуктов с заданными концентра-

циями легких и тяжелых примесей в каждом продукте  $\eta_i^L$  и  $\eta_i^T$ . Отметим, что задача может быть легко обобщена, когда в качестве продуктов с установки отбираются фракции, каждая из которых состоит из нескольких компонентов.

Любую РК при произвольном варианте схемы разделения можно охарактеризовать тремя параметрами: числом основных компонентов, поступающих на разделение в данную колонну (без учета легкого и тяжелого примесных компонентов)  $I$ ; номером первого основного компонента, поступающего в эту колонну (для определенности все компоненты расположены в порядке возрастания летучести)  $J$  и внутренним номером тяжелого ключевого компонента  $K$  (т.е. считая первым компонентом  $J$ -й компонент исходной смеси). Рассматриваемые параметры могут изменяться в следующих пределах:  $I$  – от двух до  $N$ ,  $J$  – от 1 до  $(N - I + 1)$  и  $K$  – от 1 до  $(I - 1)$ .

Обозначим ПЗ на разделение в рассматриваемой колонне при некотором оптимальном флегмовом числе через  $Z_{I,J,K}$ . Эта величина не должна зависеть от схемы СР.

Если минимальные затраты на полное разделение  $I$ -компонентной смеси с  $J$ -м первым компонентом (т.е. затраты при оптимальной схеме) обозначить через  $F_{I,J}$ , то легко видеть, что

$$\left. \begin{aligned} F_{2,J} &= Z_{2,J,I}; \\ F_{3,J} &= \min_K [Z_{3,J,K} + F_{K,J} + F_{3-K,J+K}]; \\ &\dots \\ F_{N,1} &= \min_K [Z_{N,1,K} + F_{K,1} + F_{N-K,1+K}]. \end{aligned} \right\} \quad (9.25)$$

Равенства (9.25) представляют собой систему уравнений задачи динамического программирования, соответствующей рассматриваемой задаче синтеза. Очевидно, что формально входящие в систему уравнений (9.25) величины  $F_{1,J}$  равны нулю. Система уравнений описывает многостадийный выбор оптимальной схемы системы разделения исходной  $N$ -компонентной смеси и имеет по сравнению с другими задачами динамического программирования ряд специфических особенностей. Под отдельной стадией в данном случае следует понимать не элемент, подсистему или стадию ХТС, а стадию информационной операции выбора. При этом на некоторой стадии происходит по существу выбор оптимальных схем системы разделения всех  $I$ -компонентных упорядоченных смесей, входящих в рассматриваемую  $N$ -компонентную смесь. Параметром управления на каждой стадии является номер тяжелого ключевого компонента  $K$  в первой колонне по ходу разделения рассматриваемой  $I$ -компонентной смеси. При выборе на каждой стадии используется информация о целевых функциях затрат  $F_{I,J}$ , полученная на всех предыдущих стадиях.

Особенностью задачи является также то, что объем информации, перерабатываемой на каждой стадии, существенно различен. Если на 1-й стадии ( $I = 2$ ) выбор вообще не производится ( $K = 1$ ), то при  $I = 3$  величина  $K$  пробегает значения 1 и 2, а при  $I = N$  уже может принимать значения от 1 до  $N - 1$ . Переменным является и число вычисляемых на каждой стадии функций  $F_{I,J}$ , определяемое диапазоном изменения параметра  $J$ .

Как это характерно для задач динамического программирования, процедура решения включает в себя два этапа: прямую и обратную процедуры. В процессе прямой процедуры последовательно определяются значения функций  $F_{I,J}$  в соответствии с системой уравнений (9.25). Эти значения, а также соответствующие значения оптимального параметра  $K$  для каждого сочетания  $I$  и  $J$  сохраняются в памяти ЭВМ. В результате прямой процедуры определяются минимальные затраты на разделение при оптимальной схеме  $C = F_{N,1}$ .

Хранящиеся в памяти ЭВМ оптимальные значения параметров  $K$  используются при обратной процедуре, в результате которой получают информацию об оптимальной схеме СР.

По оптимальному параметру  $K_{N,1} = A_1$  из памяти выбираются значение  $F_{A,1}$  и оптимальный параметр  $K_{A,1}$ , а также значение  $F_{N-A,A+1}$  и оптимальный параметр  $K_{N-A,A+1} = A_2$ . Параметры  $A_1$  и  $A_2$  используются при следующем шаге выборки. Процесс обратной процедуры в общем случае является ветвящимся. Он может быть определенным образом упорядочен. После завершения обратной процедуры из ЭВМ выводится следующая информация для каждой колонны по ходу найденной оптимальной схемы разделения:  $I$ ,  $J$ ,  $L$  (номер тяжелого ключевого компонента в общем списке) и  $M$  (ПЗ на разделение в данной колонне).

## 9.6. МЕТОД СИНТЕЗА РЕСУРСОСБЕРЕГАЮЩИХ СИСТЕМ РЕКТИФИКАЦИИ СО СВЯЗАННЫМИ ТЕПЛОВЫМИ ПОТОКАМИ

Поскольку для функционирования обычных СР необходимы значительные затраты внешних энергоресурсов, которые составляют до 70% стоимости всей СР, особое внимание уделяется разработке ресурсосберегающих СР со связанными тепловыми потоками (СРТП).

СРТП обеспечивают получение заданного количества продуктов разделения МКС при минимальных энергозатратах, что обусловлено интегральной рекуперацией тепловой энергии внутренних ТП.

Любая СРТП состоит из двух взаимосвязанных функциональных подсистем – подсистемы разделения МКС и тепловой подсистемы энергообеспечения для осуществления процессов разделения.

Разработка оптимальных СРТП возможна только в результате совместного решения как задачи синтеза подсистемы разделения МКС, так и задачи синтеза ТС энергообеспечения.

В СР стоимость затрат энергии на разделение определяется следующими основными составляющими:

1) стоимостью оборудования, используемого для подвода и отвода энергии (кубы и дефлектиоры колонн, теплообменники и т. д.) и стоимостью подводимой внешней энергии;

2) наличием в системе потоков, энергия которых может быть использована для обеспечения энергоснабжения самой системы (например, тепло отводимых с верха ректификационных колонн потоков пара, которые можно применять для нагревания кубовых продуктов других колонн). Последнее обстоятельство и позволяет, таким образом, организовать схему энергообеспечения при синтезе системы ректификационных колонн, что значительно снижает потребность в энергии, подводимой от внешних источников, а это приводит к существенному снижению стоимости эксплуатации СР.

В общем случае, чтобы определить такую систему, при которой обеспечивается соответствие источников энергии и ее «потребителей» в пределах схемы с реализуемой последовательностью разделения многокомпонентной смеси, необходимо решить задачу интегральной рекуперации энергии внутренних технологических потоков системы.

Метод синтеза ресурсосберегающих СРТП состоит из следующих основных этапов:

1) определение смеси, подлежащей разделению, и потоков, которые могут быть получены в системе (верхние и нижние продукты разделения) и использованы в дальнейшем при построении системы энергоснабжения (для синтеза ТС энергообеспечения можно применить метод, рассмотренный в разделе 9.3);

2) выбор давления в системе колонн разделения (в данном случае обсуждается задача синтеза только изобарных систем колонн);

3) расчет температур точек кипения или точек росы потоков, получаемых при разделении каждой возможной фракции в предположении, что степень извлечения каждого компонента достигает 98–99%;

4) определение всех взаимосвязей ТП между которыми возможен обмен тепловой энергией;

5) если какая-либо взаимосвязь потоков, установленная на предыдущем этапе, является реализуемой, то для нее стоимость внешних теплоносителей принимается равной 0. В противном случае рассчитывается стоимость дополнительного теплообменного оборудования (в первом случае предполагается, что для организации теплообмена может быть использовано теплооб-

менное оборудование самих колонн, т. е. дефлэгматоры и кипятильники колонн ректификации);

6) определение значений минимального числа тарелок  $N_{\min}$  и минимального флегмового числа  $R_{\min}$  для каждой колонны;

7) ранжировка по стоимости для всех возможных технологических схем взаимосвязи потоков в ТС. При этом допускается многократное и одновременное использование одних и тех же потоков в различных элементах ТС;

8) проверка сходимости решения задачи определения стоимости энергообеспечения. Если решения не сходятся, то принять текущее полученное значение стоимости и возвратиться к этапу 6. В противном случае решение задачи продолжается;

9) ранжировка по стоимости проведения процессов разделения всех возможных фракций компонентов;

10) для каждой из подзадач разделения определенных фракций (бинарных, тройных и т. д.) выбирается разделение, соответствующее минимальной стоимости;

11) проверка реализуемости результатов синтеза схемы СР методом динамического программирования при условии обеспечения минимальной стоимости схемы в целом (см. раздел 9.5);

12) проверка присутствия в полученной технологической схеме СР многократно и одновременно используемых потоков энергии. Если «да», возвратиться на этап 11 и определить следующую наиболее экономичную схему системы колонн разделения. Если «нет», то получена оптимальная технологическая схема СР, в которой осуществляется интегральная рекуперация энергии внутренних ТП.

Рассмотрим более детально некоторые из этапов изложенного метода. На первом этапе обязательно определяются и те потоки, энергия которых может быть использована в соответствии с принципом интеграции, но не являющиеся потоками продуктов разделения. К таким потокам можно отнести, например, выходные потоки реакторных систем, тепло которых может применяться для подвода энергии к некоторой ректификационной колонне. Далее анализируется разделяемая смесь, в результате чего получается список всех фракций, получение которых возможно при разделении данной смеси.

Все потоки фракций рассматриваются как потенциальные составляющие интегральной системы использования энергии в системе разделения. Для некоторой определенной последовательности проведения процесса разделения исходной смеси только некоторую часть таких потоков можно применять для построения реализуемой ТС.

На рис. 9.17 показана типичная схема организации энергетической взаимосвязи потоков для двух возможных подзадач разделения. В данном случае  $D$  – верхний продукт разделения смеси  $DE$  (поток компонента  $D$ ) – технологически объединяется

с кубовым продуктом разделения фракции  $AB$  (потоком компонента  $B$ ).

Кроме рассмотренного варианта возможно объединение и других потоков в данной системе колонн, но, как правило, температуры этих других потоков явно недостаточны для организации эффективного процесса теплообмена между ними. Поэтому в дальнейшем анализируется возможность объединения только потоков, подаваемых в конденсаторы и кипятильники колонн.

Решение каждой подзадачи разделения приводит к образованию потоков, которые могут быть использованы для организации взаимосвязей между кипятильником или (и) дефлектиором колонны, соответствующей данной подзадаче, и другими источниками и потребителями тепла в системе колонн. Многие из таких взаимосвязей оказываются технологически не реализуемыми по ряду причин.

С целью выявления таких нереализуемых взаимосвязей потоков в системе используют следующие ЭП:

1) потоки, являющиеся источниками энергии в системе, могут быть объединены только с потоками – потребителями энергии;

2) существование объединяемых потоков в синтезируемой системе определяется ограничениями, соответствующими ранжированному списку компонентов и условию высокой разделятельной способности каждой ректификационной колонны в системе.

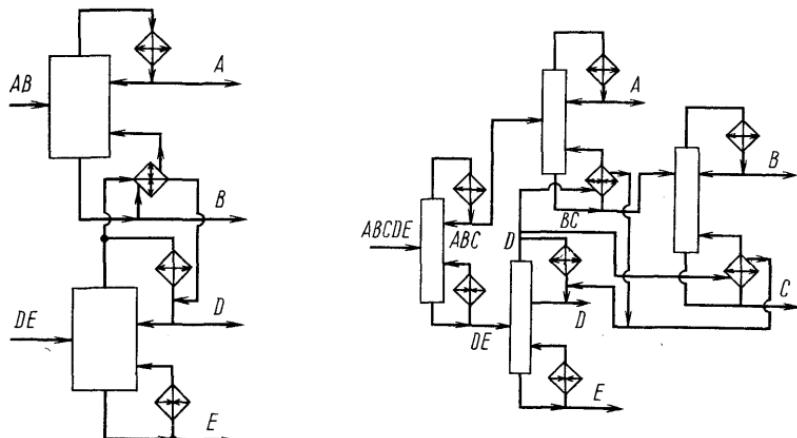


Рис. 9.17. Один из возможных вариантов структуры энергетических взаимосвязей технологических потоков для двух подзадач разделения

Рис. 9.18. Оптимальная технологическая схема ректификационной системы со связанными тепловыми потоками для разделения пятикомпонентной смеси ( $A, B, C, D, E$ )

Таблица 9.5. Матрица предварительных возможных вариантов объединения энергетических потоков при построении структурных схем ректификационных систем для разделения пятикомпонентной смеси ABCDE

Холодные потоки	Горячие потоки																
	A				B				C				A	B	C	D	E
	A	B	C	D	A	B	C	D	A	B	C	D	A	B	C	D	E
B	5	4,5	F	F	5	4	F	F	4	F	F	F					
C	5	5	4,5	F	5	5	4	5	5	F	F	F					
D	5	5	5	4,5	5	5	5	5	5	5	5	F					
E	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	5	F					
BC	5	5	4,5	F	3,5	4,5	3,5	5	4,5	5	5	F					
CD	5	5	5	4	5	3,5	4,5	4,5	5	5	5	F					
DE	5	5	5	5	5	3,5	3,5	5	4,5	4,5	4,5	F					
BCD	5	5	F	4	4,5	5	4,5	4,5	4,5	4,5	4,5	F					
CDE	5	5	5	F	5	4,5	5	4,5	4,5	4,5	4,5	F					
BCDE	5	5	F	F	4,5	5	F	4,5	5	5	3,5	F					
ABCDE	F	F	F	F	F	F	F	F	F	F	F	5					

Таким образом, характер интеграции потоков энергии изменяется в зависимости от выбранной схемы системы разделения. При этом на основе применения второго закона термодинамики и анализа ранжированного списка компонентов оказывается возможным исключить определенные связи энергетических потоков.

При синтезе изобарной системы колонн с использованием ранжировки компонентов по их относительным летучестям применяют различные ЭП синтеза схемы СРТП. Для изобарного процесса полагают, что потоки питания и продуктов разделения представляют собой насыщенную жидкую fazу. Более того, при реализации процессов конденсации и испарения принимают, что температуры потоков не изменяются и не существует переохлаждения или перегрева потоков в синтезируемой системе.

В матрице вариантов объединения потоков для рекуперации тепловой энергии в ТС (табл. 9.5) представлены все возможные варианты объединения потоков в схеме разделения для организации процессов теплообмена. Индекс F означает, что объединение данных потоков практически реализуемо. В случае нереализуемости процесса теплообмена между какими-либо потоками в соответствующем элементе матрицы указаны номера перечисленных выше правил, в силу которых их объединение нереализуемо. Кроме определения тех потоков, между которыми реализуемы процессы теплопередачи, необходимо также знать количество энергии, соответствующее каждому потребителю. Количество энергии в каждом из таких потоков определяется параметрами технологического режима РК.

Ранее на основе определенного списка всех фракций, образуемых при разделении исходной смеси, рассчитывались температуры конденсации и кипения для соответствующих потоков.

Полученные при этом величины соответствуют оптимальной стоимости реализации СР, определяемой методом динамического программирования (см. раздел 9.5).

После нахождения этих температур некоторые реализуемые варианты объединения энергопотоков из матрицы (см. табл. 9.5) могут быть исключены на основе второго закона термодинамики. Далее определяется стоимость реализации разделения для каждой из подзадач при всех возможных вариантах интеграции энергетических потоков в СР. На следующем этапе определяется стоимость реализации системы разделения с учетом капитальных и энергетических затрат. Все возможные схемы СР ранжируются по величине этой стоимости; при этом в каждой из систем допускается многократное и одновременное использование потоков энергии на различных этапах разделения. Для каждой подзадачи разделения в изобарной системе колонн возможно три различных типа интеграции энергетических потоков.

Во-первых, конденсатор одной колонны может быть соединен потоком энергии с кипятильником другой колонны; во-вторых, кипятильник одной колонны может быть объединен потоком тепла с конденсатором другой (случай, обратный первому) и, в-третьих, как конденсатор, так и кипятильник одной колонны могут быть соединены с другими источниками или потребителями энергии.

Для неизобарных систем колонн допускается интеграция потоков только первых двух типов. В то же время возможна такая ситуация, когда часть источников (или потребителей) энергии может быть связана одновременно с несколькими другими потребителями (или источниками). В этом случае необходимо рассчитать оптимальную стоимость всех систем при всех возможных вариантах интеграции энергетических потоков. Для получаемых при этом систем колонн задача оптимизации формулируется как задача одновременной оптимизации всей системы, и решение ее осуществляется обычно с использованием методов многоуровневой оптимизации.

На следующем этапе метода с применением метода динамического программирования на основе найденных нижних пределов стоимости для каждой подзадачи разделения определяется первая СРТП. Полученная схема проверяется на условия реализуемости решения задачи объединения энергетических потоков. Для смеси *ABCDE* получена следующая оптимальная технологическая схема СРТП (рис. 9.18), которая обеспечивает 15,5% экономии общих годовых затрат на ее эксплуатацию по сравнению со схемой, построенной без учета возможности интегральной рекуперации теплоты внутренних потоков.

## **9.7. КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ И ЗАДАНИЯ ДЛЯ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ**

**В.9-1.** Объясните, какие принципы синтеза ХТС являются научной основой многостадийного эвристическо-эволюционного метода синтеза ресурсосберегающих неоднородных ХТС.

**В.9-2.** Сформулируйте основную сущность и назовите основные стадии многостадийного эвристическо-эволюционного метода.

**В.9-3.** Назовите основные этапы многоуровневого алгоритма разработки банка знаний в виде семантического графа.

**В.9-4.** Чем различаются банк знаний и банк данных, входящие в структуру интеллектуальной системы генерации структур неоднородных ХТС?

**В.9-5.** Сформулируйте понятия семантический граф и фрейм.

**В.9-6.** Какая взаимосвязь может существовать между семантическими графами и фреймами?

**В.9-7.** Объясните, можно ли рассматривать ДВР как одну из разновидностей семантических графов.

**В.9-8.** Назовите основные интеллектуальные творческие операции, выполняемые ЛПР в диалоге с ЭВМ, при реализации диалогового эвристическо-семантического алгоритма генерации альтернативных вариантов ХТС.

**В.9-9.** Сформулируйте основные физические, термодинамические и технологические ограничения инженерно-технологической, или содержательной, постановки ИЗС ресурсосберегающих теплообменных систем.

**В.9-10.** Назовите основные приемы интенсификации процессов теплообмена, которые необходимо использовать при синтезе ресурсосберегающих ХТС.

**В.9-11.** Каким образом оребрение поверхности теплообменника и повышение скорости теплоносителей влияют на интенсификацию процессов теплообмена в ТА?

**В.9-12.** Какими способами и приемами можно уменьшить термическое сопротивление пленки конденсата при конденсации пара в ТА?

**В.9-13.** Сформулируйте сущность гранично-декомпозиционного метода синтеза оптимальных ТС.

**В.9-14.** Дайте понятие ГЗС для ИЗС оптимальных ТС.

**В.9-15.** Поясните, чем различаются ГЗС различных уровней иерархии.

**В.9-16.** В чем отличие исходного начального и результирующего технологических потоков, входящих в структуру синтезируемой ТС?

**В.9-17.** Сформулируйте понятие маршрута  $k$ -го технологического потока.

**В.9-18.** Что такое внутренняя и внешняя подсистемы в структуре ресурсосберегающей ТС?

**В.9-19.** Сформулируйте инженерно-технологическую, или содержательную постановку ИЗС апликлических оптимальных систем ректификации МКС.

**В.9-20.** Назовите основные способы и приемы энергосбережения в СР.

**В.9-21.** Назовите основные способы и приемы снижения металлоемкости СР.

**В.9-22.** Назовите основные этапы декомпозиционно-топологического и декомпозиционно-эвристического методов синтеза оптимальных СР.

**В.9-23.** Запишите математическую постановку ИЗС оптимальных систем ректификации МКС с использованием ДП-принципа.

**В.9-24.** Сформулируйте понятия; точка деления ранжированной МКС и ГЗС при поиске решения задач синтеза оптимальных СР.

**В.9-25.** Назовите основные этапы эвристическо-декомпозиционного метода синтеза оптимальных СР.

**В.9-26.** Сформулируйте и дайте объяснения набору ЭП, используемых при синтезе оптимальных СР.

**В.9-27.** Объясните, чем различаются ГЗС различных уровней иерархии при поиске решений задач синтеза оптимальных СР.

**В.9-28.** Запишите математическую формулировку ИЗС оптимальных систем ректификации МКС с использованием динамического программирования.

В.9-29. В чем недостатки метода синтеза оптимальных СР с использованием динамического программирования?

В.9-30. Сравните эффективность лекомпозиционно-топологического метода синтеза оптимальных СР и метода, использующего динамическое программирование.

В.9-31. Назовите основные этапы метода синтеза оптимальных систем ректификации с взаимосвязанными тепловыми потоками.

В.9-32. Поясните, какие внутренние технологические потоки СР могут использоваться в качестве источников и приемников теплоты.

3.9-1. Составьте блок-схему диалогового эвристического-семантического алгоритма генерации альтернативных вариантов ХТС (см. раздел 9.1).

3.9-2. Составьте информационные структуры фреймов «ФР–ректификационная колонна», «ФР–процесс абсорбции», «ФР–процесс фильтрации», «ФР–химический реактор».

3.9-3. Дайте термодинамическое обоснование ЭП, используемым при синтезе оптимальных ТС.

3.9-4. Составьте блок-схему гранично-декомпозиционного метода синтеза оптимальных ТС (см. раздел 9.3).

3.9-5. Составьте операторную схему синтезированной ТС, которая отображается следующим множеством конечных маршрутов ТП: горячих – [3, 1], [4, 2, (3, 1)], [5, (4, 2)]; холодных – (5, (4, 2)), (4, 2, (3, 1)).

3.9-6. Сформулируйте инженерно-технологическую постановку следующих ГЗС: {3, (4, 1)}, {4, 2} и {3, 2}, возникающих при поиске решения ИЗС оптимальной ТС, где 1 и 2 – холодные ИТП; 3 и 4 – горячие ИТП.

3.9-7. Для заданной пятикомпонентной смеси ( $A_1, B_2, C_3, D_4, E$ ), ранжированной в порядке увеличения температуры кипения компонентов, необходимо: 1) определить число вариантов технологических схем СР, если число возможных ТОР  $S = 3$ ; 2) синтезировать вариант технологической схемы СР в соответствии с ЭП: сначала осуществить разделение по положению  $i$ -й точки деления, для которой  $\Delta t_i = t_{k+1}^{\text{кип}} - t_k^{\text{кип}} = \max$ ,  $k = 1, N - 1$ , где  $t_k^{\text{кип}}$  – заданная температура кипения  $k$ -го ключевого компонента МКС:

Компоненты . . . . .	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>E</i>
$t^{\text{кип}}, ^\circ\text{C} . . . . .$	72	59	130	162	180

3) составить полное эксплицитное дерево вариантов решений для ГЗС-{3}; 4) сравнить трудоемкость операций генерации усеченных эксплицитных ДВР для ГЗС-{3} с использованием ограниченного упорядоченного перебора вершин волновых, лучевых и луче-волновым ветвлением.

3.9-8. Составьте блок-схему метода синтеза ресурсосберегающих систем ректификации с взаимосвязанными тепловыми потоками (см. раздел 9.6).

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

Александров Е. Н. Основы теории эвристических решений. Подход к изучению естественного и построению искусственного интеллекта. М.: Советское радио. 1975. 254 с.

Бенедек П., Ласло А. Научные основы химической технологии. Л.: Химия. 1970. 376 с.

Бретшнейдер С. и др. Общие основы химической технологии. Л.: Химия. 1977. 503 с.

Егоров С. В., Миражмедов Д. А. Моделирование и оптимизация в АСУТП. Ташкент: Мехнат. 1987. 200 с.

Кафаров В. В. Методы кибернетики в химии и химической технологии. М.: Химия. 1985. 468 с.

Кафаров В. В., Мешалкин В. П., Грун Г., Нойманн В. Обеспечение и методы опти-

- мизации надежности химических и нефтехимических производств. М., Химия. 1987. 283 с.
- Кафаров В. В., Мешалкин В. П., Гурьева Л. В. Оптимизация теплообменных процессов и систем. М.: Энергоатомиздат. 1988. 192 с.
- Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М.: Наука. 1974. 831 с.
- Мешалкин В. П., Кафаров В. В. Методы автоматизированного синтеза высокоэффективных теплообменных систем и систем ректификации. Сер.: Современные проблемы химии и химической промышленности. М.: НИИТЭХИМ. 1983. Вып. 12 (150). 50 с.
- Мешалкин В. П., Кафаров В. В. Многостадийный эвристическо-эволюционный метод синтеза ХТС и его применение для проектирования оптимальных технологических схем производств органических веществ. Сер.: Современные проблемы химии и химической промышленности. М.: НИИТЭХИМ. 1982. Вып. 3 (124). 67 с.
- Кафаров В. В., Мешалкин В. П., Перов В. Л. Математические основы автоматизированного проектирования химических производств. М.: Химия. 1979. 320 с.
- Кафаров В. В., Мешалкин В. П. Ресурсосберегающие химические производства. Итоги науки и техники. Сер.: Процессы и аппараты химической технологии. М.: ВИНТИИ, 1987, т. 15, с. 85.
- Кафаров В. В., Перов В. Л., Мешалкин В. П. Принципы математического моделирования химико-технологических систем. М.: Химия. 1974. 343 с.
- Корячко В. П., Курейчик В. М., Норенков И. П. Теоретические основы САПР. М.: Энергоатомиздат. 1987. 399 с.
- Кристофидес Н. Теория графов. Алгоритмический подход. Пер. с англ. М.: Мир. 1978. 432 с.
- Кроу К., Гамильтон А. и др. Математическое моделирование химических производств: Пер. с англ. / М.: Мир, 1973. 391 с.
- Кутепов А. М., Бондарева Т. И., Беренгартен М. Н. Общая химическая технология. М.: Высшая школа. 1986. 406 с.
- Математика и САПР. книга I: Пер. с франц./Под ред. Н. Г. Волкова. М.: Мир, 1988. 206 с.
- Методы и средства автоматизированного расчета ХТС. Л.: Химия. 1987. 152 с.
- Нагиев М. Ф. Химическая рециркуляция. М.: Наука. 1978. 87 с.
- Нильсон Н. Принципы искусственного интеллекта. М.: Радио и связь. 1985. 376 с.
- Норенков И. П., Машечев В. Б. Системы автоматизированного проектирования электронной и вычислительной аппаратуры. М.: Высшая школа. 1983. 272 с.
- Смирнов Н. Н., Воложинский А. И. Химические реакторы в примерах и задачах. Л.: Химия. 1986. 224 с.
- Справочник по теории автоматического управления / Под ред. Красовского А. А.: М.: Наука. 1987. 711 с.
- Основы автоматизации управления процессов. / Под ред. Макарова И. Н. Л.: Высшая школа. 1983. 504 с.
- Основы химической технологии / Под ред. Мухленова И. П. М.: Высшая школа. 1983. 335 с.
- Островский Г. М., Бережинский Т. А. Оптимизация химико-технологических процессов. Теория и практика. М.: Химия. 1984. 239 с.
- Островский Г. М., Волин Ю. М. Моделирование сложных химико-технологических схем. М.: Химия. 1975. 311 с.
- Петлюк Ф. Б., Серафимов Л. А. Многокомпонентная ректификация. М.: Химия. 1983. 303 с.
- Петренко А. И., Семенков О. И. Основы построения систем автоматизированного проектирования. Киев: Вища школа. 1985. 294 с.
- Попырин Л. С., Самусев В. И., Эпельштейн В. Л. Автоматизация математического моделирования и оптимизация теплоэнергетических установок. М.: Наука. 1981. 236 с.

**Химико-технологические системы /Под ред. Мухленова И. П. Л.: Химия. 1986.  
424 с.**

*Berthouex P. Mac, Rudd Dale F. Strategy of Pollution Control, John Wiley & Sons, New York, Santa Barbara, London, Sydney, Toronto. 1977, 607 p.*

*Gruhn G., Kafarov V. V., Meschalkin V. P., Neumann W. Zuverlässigkeit von Chemieanlagen. Leipzig: VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie. 1979, 256 s.*

*Douglas J. M. Conceptual Design of Chemical Process, New York: Mc Graw Hill Book Company, 1988. 601 p.*

*Himmelblau D. M. Basic Principles and Calculations in Chemical Engineering. 5nd Ed. N.-Y. 1989. 425 p.*

*Himmelblau D. M., Bischoff K. B. Process Analysis and Simulations (Deterministic Systems). N.-Y. Wiley. 1968. 348 p.*

*Hlavacek V., Vaclavek V., Kubicek M. Bilancni a Simulacni Vypocty slozity process v chemicke technologie. Academia/Prahg. 1979. P. 295.*

*Rudd D. F., Powers L. J., Siirila J. J. Process Synthesis. N.-Y. Prentice-Hall. Englewood Cliffs. 1973. 320 p.*

*Rudd D. F., Watson Ch. C. Strategy of Process Engineering. N.-Y. 1968. 545 p.*

*Systemverfahrenstechnik I. Modellierung und Simulation verfahrenstechnischer Systeme. Leipzig: VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie. 1976. 240 S.*

*Systemverfahrenstechnik II. Bewertung, optimierung und Synthese verfahrenstechnischer Systeme. Leipzig: VEB Deutscher Verlag für Grundstoffindustrie. 1978. 192 s.*

*Stephanopoulos G., Townsend D. W. Inst. Chem. Eng. Symp. Ser. 1985. V. 92. P. 427-441.*

*Westerberg A. W.//Recent Developments in Chem. Process and Plant Design. 1977. John Wiley & Sons. Inc.*

*Hernaude R., Sargent R. W.//Computers and Chem. Eng. 1979. V. 3. P. 363-371.*

*Johns W. R., Romero D.//Computers and Chem. Eng. 1979. V. 3. P. 251-260.*

*Best R. J., Conners J. C., Dhalla N. S., Johns W. R., Vadhwana V. I Chem E Symposium Series № 100, 1989, p. 79-93.*

**Учебное издание**

**КАФАРОВ Виктор Вячеславович,  
МЕШАЛКИН Валерий Павлович**

**Анализ и синтез  
химико-технологических  
систем**

Редактор Л. В. Швыркова. Художественный редактор К. К. Федоров. Технический редактор В. В. Лебедева. Корректор Л. В. Лазуткина

ИБ № 2579

Сдано в набор 30.11.90. Подп. в печ. 12.09.91. Формат 60x90/16. Бумага офсетная № 2. Гарн. Литературная. Печать офсетная. Усл. печ. л. 27,00. Усл. кр.-отт. 27,00. Уч. изд. л. 31,72. Тираж 2950 экз. Заказ № 1271. Цена 4 р. 20 к. Изд. № 3581.

Ордена «Знак Почета» издательство «Химия», 107076, Москва, Строгинка, 21

Набрано на Можайском полиграфкомбинате В/О «Совэкспорткнига»  
143200, г. Можайск, ул. Мира, 93

Отпечатано с готовых пленок Московской типографией № 11 Министерства печати и информации РСФСР, 113105, Москва, Нагатинская ул., д. 1