

## **ИНТЕРАКТИВНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И ПРОЕКТИРОВАНИЕ ХТС В УСЛОВИЯХ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ**

**А.В. Майстренко, Н.В. Майстренко**

*ГОУ ВПО «Тамбовский государственный технический  
университет», г. Тамбов*

*Рецензент В.Е. Подольский*

**Ключевые слова и фразы:** интерактивное моделирование; интеллектуальный интерфейс; информационная система; неопределенность.

**Аннотация:** Анализируются подходы к интерактивному моделированию и проектированию технологических объектов, в которых все чаще используют методы структурно-параметрического синтеза для автоматического формирования математических моделей проектируемых объектов. Рассматриваются структура и работа информационной системы моделирования и проектирования химико-технологических процессов.

Применение современных средств компьютерного моделирования и интерактивных программных систем позволяет проводить анализ и синтез сложных ХТС, имеющих, как правило, рециклы и замкнутую структуру, повысить качество и сократить сроки проектирования таких систем.

Первый этап в развитии компьютерного моделирования был связан с расчетом материальных и тепловых балансов, использованием наиболее полных и совершенных модулей для расчета технологических аппаратов и банка физико-химических свойств, отвечающего последним достижениям в химической технологии [1]. Была выработана общая концепция универсальной моделирующей программы для расчета ХТС, состоящей из организующей программы, библиотеки модулей для расчета химико-технологических аппаратов, банка физико-химических свойств и библиотеки математических модулей. В результате длительного процесса (1960 – 1980 гг.) из общего числа разработанных программ выделились четыре универсальные моделирующие программы, которые заняли лидирующее

---

Майстренко А.В. – кандидат технических наук, доцент кафедры «Технологическое оборудование и пищевые технологии» ТамбГТУ; Майстренко Н.В. – кандидат технических наук, ассистент кафедры «Системы автоматизированного проектирования» ТамбГТУ, г. Тамбов.

положение в мире: ASPEN PLUS, HYSIS, CHEMCAD и PRO/II. Указанные программы обладают обширными библиотеками технологических модулей, объемными банками физико-химических свойств и удобным для пользователя интерфейсом, что позволяет их широко использовать при проектировании новых и реконструкции действующих ХТС. При этом следует отметить общую тенденцию – стремление переходить на использование в расчетах все более сложных и, соответственно, более точных математических моделей химико-технологических аппаратов.

Начало второго этапа можно условно отнести ко второй половине 1980-х гг., когда в универсальные моделирующие программы были введены оптимизационные процедуры, и их стали применять не только для расчета материальных и тепловых балансов, но и для оптимизации стационарных режимов ХТС [1]. Однако их использование для оптимизации носило редкий, в основном, исследовательский характер. Причина здесь кроется в значительно большей математической трудности оптимизационного расчета по сравнению с балансовым и в непривычности целевой функции оптимизации для разработчиков новых химических технологий и проектировщиков. Но главное принципиальное затруднение связано с наличием неопределенности в исходных данных, с которыми мы должны решать задачу оптимизации. Неопределенности практически всегда имеют место на этапе проектирования и часто – на этапе эксплуатации ХТС. Учет неопределенности информации требует как разработки новых математических постановок задач, так и новых подходов и методов их решения [1].

В настоящее время мы находимся в преддверии третьего этапа в развитии компьютерного моделирования, который отличается от первых двух тем, что при моделировании учитывается неполнота (неопределенность) информации о ХТС. Кроме того, на этом этапе приобретают решающее значение задачи автоматизации процесса подготовки, сбора и обработки больших объемов информации, в том числе графической, и максимального использования накопленных инженерных знаний при оптимизации и проектировании ХТС в условиях неопределенности. Решение этих задач требует создания компьютерной среды для формализации профессиональных знаний и инструментальных средств, облегчающих и ускоряющих исследователям и проектировщикам процессы подготовки, сбора и анализа исходных данных, а также интерактивного моделирования, оптимизации и проектирования ХТС. В традиционной схеме компьютерного моделирования компьютерная поддержка осуществляется только на стадии проведения вычислительного эксперимента, оставляя в стороне такие наиважнейшие стадии как построение математической модели функционирования ХТС, выбор экономичного алгоритма и составление программы, формализация и решение задач оптимизации, анализ и обработка результатов компьютерного моделирования и оптимизации ХТС.

Нами предпринята попытка создания информационной системы интерактивного моделирования, оптимизации и проектирования ХТС с учетом неполноты и неточности (неопределенности) исходной физико-химической, технологической и экономической информации [2, 3]. В этих условиях при моделировании и оптимизации ХТС необходимо формулиро-

вать и решать две важные задачи: 1) оценка гибкости, то есть способности ХТС сохранять свою работоспособность независимо от неопределенности исходной информации; 2) оптимизация в условиях неопределенности, которая эквивалентна задаче выбора оптимальных коэффициентов запаса технического ресурса технологического оборудования (числа тарелок в ректификационной колонне, объема и длины реактора, поверхности теплообмена в теплообменнике, мощности насосов и мощности электроприводов в аппаратах с мешалками и т.п.), гарантирующих сохранение работоспособности (гибкости ХТС) во время эксплуатации.

Информационная система выполняет рабочие и сервисные функции, для реализации которых ее структура включает диалоговый процессор, планировщик, интеллектуальный банк данных, библиотеки моделей типовых химико-технологических операторов, методов и алгоритмов численных методов, блок специальных средств. Синтез математических моделей ХТС, настройка информационной системы на решение той или иной задачи осуществляются планировщиком исходя из требований формализованного знания, поступающего на вход диалогового процессора. Планировщик намечает схему прохождения информации через систему и выбор программных модулей, необходимых для решения поставленной задачи. Непосредственное формирование математической модели осуществляется путем объединения во фреймах-прототипах присоединенных процедур. Вся необходимая для расчетов информация хранится в интеллектуальном банке данных: база данных содержит физико-химические свойства перерабатываемых веществ, теплофизические и другие характеристики конструкционных материалов технологических аппаратов, ряд дополнительных исходных данных для решения задач моделирования, оптимизации и проектирования ХТС, а база знаний включает модель представления предметной области в виде правил продукции и фреймов-прототипов типовых химико-технологических процессов. По сути, фрагментом фрейма-прототипа является экземпляр графической базы данных, в которой содержится графический примитив, обозначающий аппарат для протекания какого-либо процесса тонкого органического синтеза, и его спецификация.

В рамках разработки интеллектуального интерфейса и интерактивных средств поддержки принятия решений при моделировании и проектировании в информационной системе были решены следующие задачи: адаптация к пользователю, поставленной исследовательской задаче, предметной области за счет фреймового представления предметной области (процессы diaзотирования и азосочетания); моделирование диалога с пользователем с различными способами взаимодействия (интерфейс с графическим построением запросов; интерфейс, основанный на заполнении форм запросов; интерфейс, основанный на использовании ограниченного естественного языка); моделирование пользовательских задач, решаемых в рамках предметной области.

Информационная система представляет собой электронную энциклопедию по химико-технологическим процессам, машинам и аппаратам химических производств. Математическое обеспечение системы включает современные эффективные (быстродействующие) и надежные алгоритмы и программы: 1) моделирования, расчета и анализа гидродинамики пото-

ков в технологических аппаратах, статических и динамических режимов и характеристик ХТС; 2) параметрической оптимизации режимных и конструктивных параметров ХТС в условиях неопределенности; 3) расчета прочности, показателей надежности и износостойкости деталей и узлов машин и аппаратов химических производств; 4) оптимального проектирования как отдельных технологических машин и аппаратов, так и сложных ХТС (синтез технологической схемы, выбор площадки строительства, компоновка технологического оборудования, трассировка трубопроводных и электрических коммуникаций и т.п.).

С использованием информационной системы интерактивного моделирования и проектирования процессов и аппаратов тонкого органического синтеза проведены исследования режимов функционирования процессов диазотирования и азосочетания синтеза азокрасителей с целью определения наиболее существенных управляющих входных переменных процессов и опасных возмущающих воздействий, знание которых помогло сформулировать и решить задачи оптимизации исследуемых процессов.

Анализ результатов интерактивного моделирования показал, что для управления процессом диазотирования целесообразно использовать распределение подачи нитрита натрия и температуры по зонам реактора диазотирования. При случайных изменениях концентрации твердой фазы амина и среднего размера частиц амина в питании реактора значительно снижается выход диазосоединения, и нарушаются условия (ограничения) технологического регламента процесса диазотирования. В качестве управляющих воздействий целесообразно использовать расходы суспензии амина или нитрита натрия, а также распределение подачи нитрита натрия и температуры по секциям реактора.

Результаты исследования процесса азосочетания в интерактивной системе позволили установить, что скорость азосочетания лимитируется скоростью кристаллизации азокрасителя, причем этот процесс протекает в смешанной диффузионно-кинетической области. Наиболее важной технологической переменной процесса азосочетания является величина рН среды сочетания, не только влияющая на степень выхода целевого продукта и количество побочных продуктов (диазосмол) в нем, но и определяющая главным образом параметры гранулометрического распределения кристаллов пигмента. Наиболее опасным возмущающим фактором процесса азосочетания является соотношение мольных подач азо- и диазосоставляющих в питании реакторной системы, которое может быть компенсировано изменением подачи азосоставляющей. Все это в целом определяет физико-колористические свойства получаемого пигмента.

На основе результатов проведенных исследований статических режимов были сформулированы и решены в двух постановках (с «жесткими» и вероятностными ограничениями) задачи оптимизации в условиях неопределенности технологических режимов диазотирования и азосочетания для опытно-промышленной установки производительностью 1000 т/год. При этом в качестве критерия оптимизации использовались приведенные затраты на производство 1 т пигмента:

Полученные конструкции реакторных установок diaзотирования и азосочетания составили основу реакционного отделения опытно-промышленной установки непрерывного синтеза азопигментов производительностью 1000 т/год, состоящего из пятитимодульной реакторной системы diaзотирования и двухмодульной реакторной системы азосочетания типа «царга-тарелка».

Анализ результатов решения сформулированных задач показал, что выбранная постановка задач оптимального проектирования и реализованный в интерактивной системе алгоритм ее решения позволяет получить такие конструкции реакторных систем diaзотирования и азосочетания, которые будут обеспечивать осуществление химических процессов с выполнением всех технологических ограничений. Однако, как показали дополнительные исследования, данные конструкции реакторных систем были получены с некоторым запасом технического ресурса, что объясняется необходимостью обеспечения работоспособности реакторной системы при отклонении неопределенных параметров от номинальных значений.

При этом учет неопределенности при решении задач оптимизации показал, что безусловное выполнение технологических ограничений по сравнению с требованием их вероятностного выполнения требует большего запаса технических ресурсов реакторных установок. Однако и вероятностный подход позволяет обеспечить выполнение условия работоспособности (гибкости) реакторных систем и получить при меньших затратах такую конструкцию химико-технологического аппарата, которая окажется работоспособной в процессе ее эксплуатации.

Окончательный выбор той или иной реакторной установки с системой оптимальных режимов функционирования может быть сделан только в результате дальнейшего проектирования и решения задачи синтеза технологического комплекса «ХТП – система управления автоматизированного комплекса».

Разработанная интерактивная система эффективно используется в учебном процессе Технологического института ТГТУ, на совершенно новом уровне организуются лекционные, лабораторные, практические занятия и, что важно, самостоятельная работа студентов по таким традиционно сложным дисциплинам, как «Процессы и аппараты химических технологий», «Машины и аппараты химических производств», «Математическое моделирование и оптимизация технологических процессов и оборудования», «САПР», «Проектирование химических производств» и др. Графические возможности визуализации позволяют наглядно представить объект расчета и результаты, полученные в ходе решения.

В заключение отметим, что с помощью интерактивных компьютерных систем моделирования можно оценить эффективность принятия решений в технике и экономике, всесторонне анализировать сложные процессы, ситуации и проекты. При этом ускоряется процесс исследований и разработок, сокращаются затраты на реализацию проектов и, что немаловажно, необходимый результат достигается неразрушающими и природосберегающими методами.

### *Список литературы*

1. Волин, Ю.М. Три этапа компьютерного моделирования химико-технологических систем / Ю.М. Волин, Г.М. Островский // Теорет. основы хим. технологии. – 2006. – Т. 40, № 3. – С. 302–312.

2. Майстренко, А.В. Интеллектуальная система математического моделирования, оптимизации и проектирования процессов и аппаратов / А.В. Майстренко, Н.В. Игнатъева // Математические методы в технике и технологиях ММТТ-15 : сб. тр. XV Междунар. науч. конф. – Тамбов, 2002. – Т. 9. – С. 14–15.

3. Дворецкий, С.И. Структура системы компьютерного моделирования и проектирования химических производств / С.И. Дворецкий, А.В. Майстренко, Н.В. Игнатъева // Математические методы в технике и технологиях ММТТ-16 : сб. тр. 16 Междунар. науч. конф. – СПб., 2003. – Т.3. – С. 148–150.

---

## **Interactive Modeling and Designing of Chemical-Technological System with Conditions of Uncertainties**

**A.V. Maystrenko, N. V. Maystrenko**

*Tambov State Technical University, Tambov*

**Key words and phrases:** interactive modeling; intellectual interface; information system; uncertainty.

**Abstract:** The approaches of interactive modeling and designing of technological object, which include structural-parametric synthesis methods for automatic mathematical models creating, are analyzed. The structure and the functioning of information system of modeling and designing chemical-technological processes are considered.

---

© А.В. Майстренко, Н.В. Майстренко, 2008