

Моделирование сложных систем

Аналитические методы построения моделей
химико-технологического процесса

Фетисов Михаил Вячеславович
fetisov.michael@bmstu.ru
fetisov.michael@yandex.ru

Балансовые соотношения.

Виды записи

- Материальный баланс может быть записан

- через массовые расходы G :
- через объёмные:
- если допустить, что плотность не изменяется, то можно записать чисто объёмный баланс
- тепловой баланс:

$$G_{\text{прихода}} = G_{\text{расхода}}$$

$$(Q\rho)_{\text{прихода}} = (Q\rho)_{\text{расхода}}$$

$$Q_{\text{прихода}} = Q_{\text{расхода}}$$

Балансовые соотношения

Особенности

- Балансовые соотношения записываются как для всего потока вместе, так и для потока каждого компонента в отдельности
- При формировании балансовых соотношений необходимо всегда помнить о том, что могут существовать внутренние источники:
 - вещества (химическая реакция, вызывающая исчезновение одних веществ и появление других)
 - энергии (выделение тепла при химических превращениях)
 - движения (работа двигателя)

Балансовые соотношения

Составные части и предметные области

- Модель химико-технологического процесса может включать:
 - модели потоков
 - модели массообмена
 - модели теплообмена
 - модели химических реакций
 - модели тепловых эффектов
 - различные связующие соотношения, уравнения.
- При моделировании объектов другого назначения могут быть выделены и иные составные части
- Сложные модели часто объединяют несколько предметных областей и/или отраслей науки (для которых могут существовать похожие понятия с разным смыслом).
- В этом случае часто важно стараться изолировать модели из разных областей, на сколько это возможно (см. Driven Domain Design, DDD)

Система допущений

Обоснование допущений

- Справедливость принимаемых допущений должна обосновываться
 - Принимаемые без достаточного обоснования допущения могут не только исказить результаты моделирования, внести погрешность в расчётные значения, но и полностью сделать модели неадекватной, т. е. неприменимой для практического использования!

Система допущений

Группы допущений

- Допущения о постоянстве или возможном законе изменения физических свойств участвующих в процессе веществ
 - Физические свойства веществ зависят от температуры, давления, состава и других факторов, которые так или иначе и меняются в химико-технологических процессах
- Допущения о неизменности или характере изменения геометрических размеров аппарата
 - Сами формы аппаратов изменяются довольно мало и редко, однако следует учитывать сложность форм, которые делают такими рази оптимизации некоторых процессов
- Допущения о характере потоков веществ, энергии
 - Следует ответить на вопрос в необходимости знания законов распределения параметров процесса
- Допущения о значимости отдельных явлений в процессе, о необходимости их учёта в модели
 - Многие явления могут оказаться вообще неизвестными, другие — недостаточно изученными для надёжного математического описания
- Допущения о потерях вещества или энергии
 - Даже, если вы добились минимизацией таких потерь, как быть с моделью износа, усталости материала и другими факторами, которые в некоторых моделях нельзя игнорировать.

**Моделирование простейших
ТИПОВЫХ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
процессов**

Моделирование простейших типовых процессов

- Все технологические процессы можно представить в виде совокупности взаимодействующих простейших составляющих
- Это позволяет предложить модели этих простейших процессов, используя которые можно построить модель большинства достаточно сложных процессов
- Кроме того, демонстрация вывода моделей простейших процессов позволяет лучше усвоить технологию моделирования
- Чаще всего модели строят для расчёта систем автоматического регулирования (ТАР) и систем автоматического управления (САУ). В этом случае нужно иметь модель с параметрами регулирования, возмущения и управления.

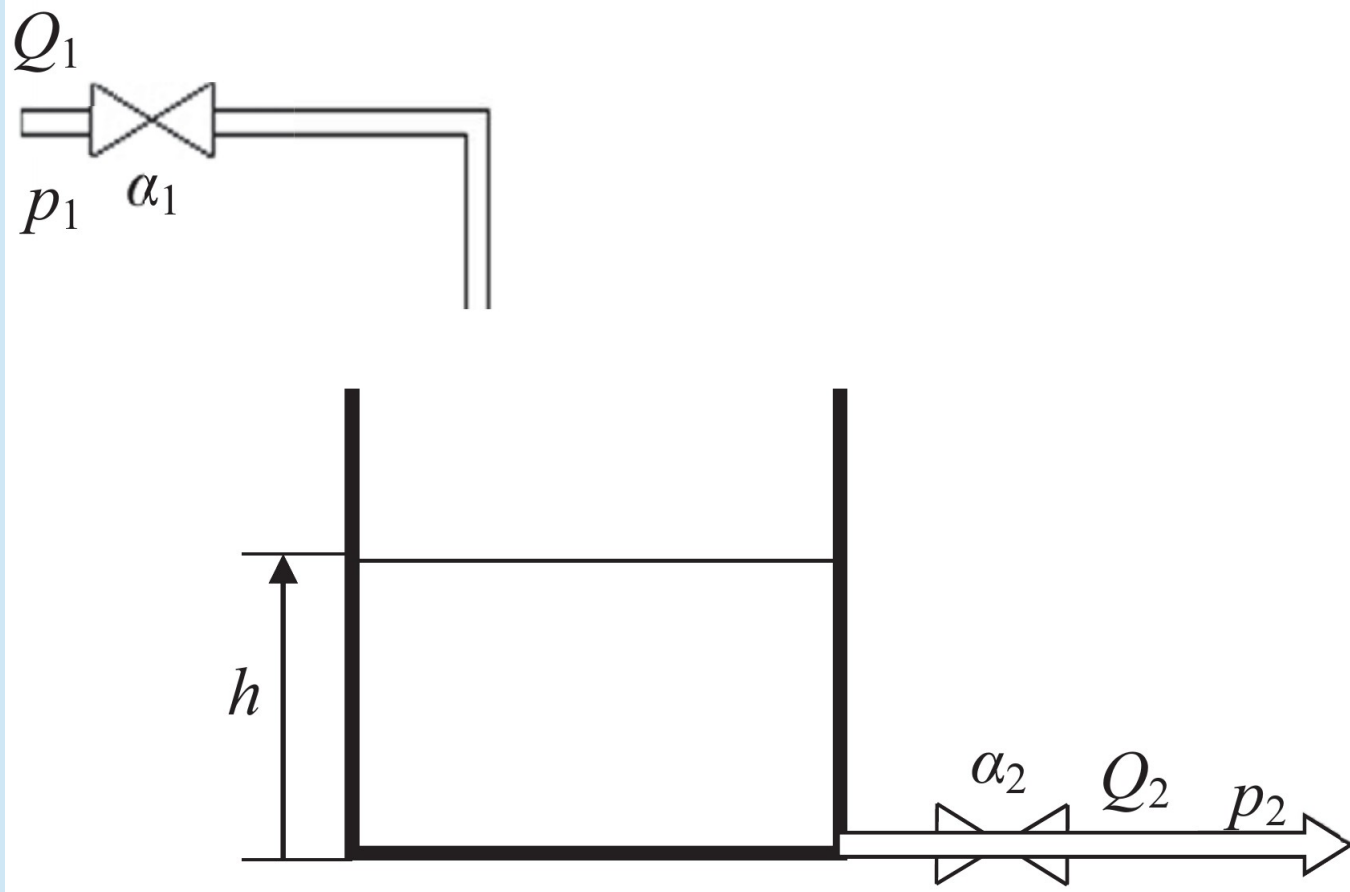
Накопление жидкости в аппарате

Принятые допущения

- Исходя из условий функционирования процесса полагаем, что температура входящей жидкости практически неизменна, её состав также постоянен, температура среды в которой расположен бак, также неизменная, поэтому можно пренебречь изменением плотности жидкости и её вязкости считать их постоянными: $\rho = \text{const}, \mu = \text{const}$
- Сечение аппарата, как функция высоты постоянно:
- Сечением (диаметром) трубопровода по сравнению с сечением (диаметром) бака можно пренебречь. $S(h) = \text{const}$

Накопление жидкости в аппарате

Схема



Накопление жидкости в аппарате

Балансовое соотношение, статика

- Записываем материальный баланс по расходу в статике:

[Количество вещества пришло] = [Количество вещества ушло],

$$Q_1^0 \rho = Q_2^0 \rho, \text{ или } Q_1^0 \rho - Q_2^0 \rho = 0.$$

- Индекс «0» соответствует статическому уровню. Сокращая плотность получим: $Q_1^0 = Q_2^0$, или $Q_1^0 - Q_2^0 = 0$
- Если произойдёт изменение какого-то входного потока, то баланс между входным и выходным потоками не будет соблюдаться и вещество будет накапливаться.

Накопление жидкости в аппарате

Балансовое соотношение, динамика

Пусть поток Q_1^0 изменился и стал $Q_1 = Q_1^0 + \Delta Q_1$, а Q_2^0 изменился и стал $Q_2 = Q_2^0 + \Delta Q_2$. При этом за время Δt в аппарате накопится некоторое количество вещества ΔM : $\Delta M = (Q_1 - Q_2)\rho\Delta t$, которое приведёт к изменению уровня жидкости на Δh , т. е. $\Delta M = \Delta h S \rho$, где S – сечение аппарата.

Делая очевидные преобразования, получаем

$$S \cdot \frac{\Delta h}{\Delta t} = Q_1 - Q_2.$$

Переходим к бесконечно малым и берём предел при $\Delta t \rightarrow 0$.

$$S \cdot \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\Delta h}{\Delta t} = Q_1 - Q_2 \quad \text{или} \quad S \cdot \frac{dh}{dt} = Q_1 - Q_2$$

– материальный (объёмный) баланс вещества в динамике. Далее будем говорить «материальный баланс», даже если он сведён к «объёмному балансу».

$$[\text{Скорость накопления объёма вещества}] = [\text{Объёмный расход на притоке}] - [\text{Объёмный расход на стоке}].$$

Накопление жидкости в аппарате

Модель динамики в нелинейном виде

- Рассмотрим случай, когда истечение из бака определяется только высотой столба жидкости в аппарате (истечение свободное),
в этом случае: $Q_2 = f(h)$, $Q_2 = \beta_2 F \sqrt{2\rho(p - p_{\text{внеш.}})} = \alpha_2 \sqrt{p - p_{\text{истеч.}}}$.
- Принимая истечение свободным, запишем $p_{\text{истеч.}} = 0$
а давление в аппарате выразим через высоту столба жидкости h , которая является «движущей силой» выходного расхода и легко измеряется в процессе: $Q_2 = \alpha_2 \sqrt{\rho gh}$
- где α — обобщённый коэффициент расхода

$$S \cdot \frac{dh}{dt} = Q_1 - \alpha_2 \sqrt{\rho gh} \quad \text{— модель динамики в нелинейном виде.}$$

Накопление жидкости в аппарате

Модель динамики в линейном приближении

- Если нужна модель для автоматического регулирования процесса в линейном приближении, то её обычно линеаризуют:

$$S \frac{dh}{dt} = \Delta Q_1 - \alpha_2 \sqrt{\rho g \Delta h} .$$

- Линеаризацию обычно делают путём разложения нелинейной функции в ряд Тейлора в окрестности номинального (базового) режима. При этом обычно ограничиваются свободным и линейным членами разложения.

- Тогда
$$Q_2 = Q_2^0 + \frac{dQ_2}{dh} \cdot \Delta h .$$

- С учётом этого динамика в отклонениях:

$$S \frac{dh}{dt} = \Delta Q_1 - \frac{dQ_2}{dh} \cdot \Delta h = \Delta Q_1 - k_1 \cdot \Delta h \text{ — линеаризованная модель.}$$

Накопление жидкости в аппарате

Рекомендуемые этапы вывода модели

- Анализ процесса и определение входных и выходных воздействий, а также определение каналов, по которым будет строиться модель
- Принятие основных допущений; в случае необходимости, допущения могут пополняться в процессе вывода
- Запись уравнений баланса (вещества, энергии)
- Рассмотрение приращений выходных воздействий (по тем каналам, по которым нужно построить модель)
- Составление баланса в приращениях в динамике. После приобретения навыка построения модели баланс в динамике можно записывать сразу в следующей форме:
скорость изменения накопления вещества (или энергии) равна разности прихода и ухода вещества (энергии)
- Исходя из необходимости — проведение линеаризации модели и получение передаточной функции
- Возможно (в случае необходимости) проведение преобразования переменных с целью приведения их к безразмерному виду.

Численное моделирование

SIMODO - /home/mfetisov/projects/SIMODO/loom/test/examples/mcc

File Edit Run View Window Help

Home: mcc

- модел
- хт-процессы
 - бак с подачей снизу (1).s-o...
 - бак с подачей снизу (2).s-o...
 - простой бак.s-ode
 - транспортировка жидкост...
- подача снизу.s-script
- простой бак.s-script
- транспортировка.s-script

```
1 import "модел/хт-процессы/простой бак.s-ode" :
2   b = {
3     h : 0.,
4     Q1 : 10.,
5     a2 : 1.,
6     p : 1.,
7     g : 1.,
8     S : 10.
9   }
10
11 import "//chart.s-script" : chart
12
13 call chart.init("Высота жидкости")
14 call chart.addSeries("h", chart.style.line)
15
16 call chart.initN("Объёмы входа-выхода", 1)
17 call chart.addSeriesN("Q1", chart.style.line, 1)
18 call chart.addSeriesN("Q2", chart.style.line, 1)
19
20 import "//scene.s-script" : scene =
21 {
22   tk : 1000.0,
23   dt : 0.1,
24   objects : [b],
25   iteration_step : 10,
26   callback : fn [chart, b, scene] () {
27     call chart.addPoint("h", scene.t, b.h)
28     call chart.addPointN("Q1", scene.t, b.Q1, 1)
29     call chart.addPointN("Q2", scene.t, b.Q2, 1)
30   }
31 }
32
33 call scene.start()
34
```

Chart: Высота жидкости

Rubber band Smooth lines

Time (t)	Height (h)
0.0	0.0
250.0	~49.8
500.0	~74.6
750.0	~94.5
1000.0	~99.5

Chart: Объёмы входа-выхода

Rubber band Smooth lines

Time (t)	Q1	Q2
0.0	10.0	0.9
250.0	10.0	~5.5
500.0	10.0	~7.7
750.0	10.0	~9.5
1000.0	10.0	10.0

Global messages

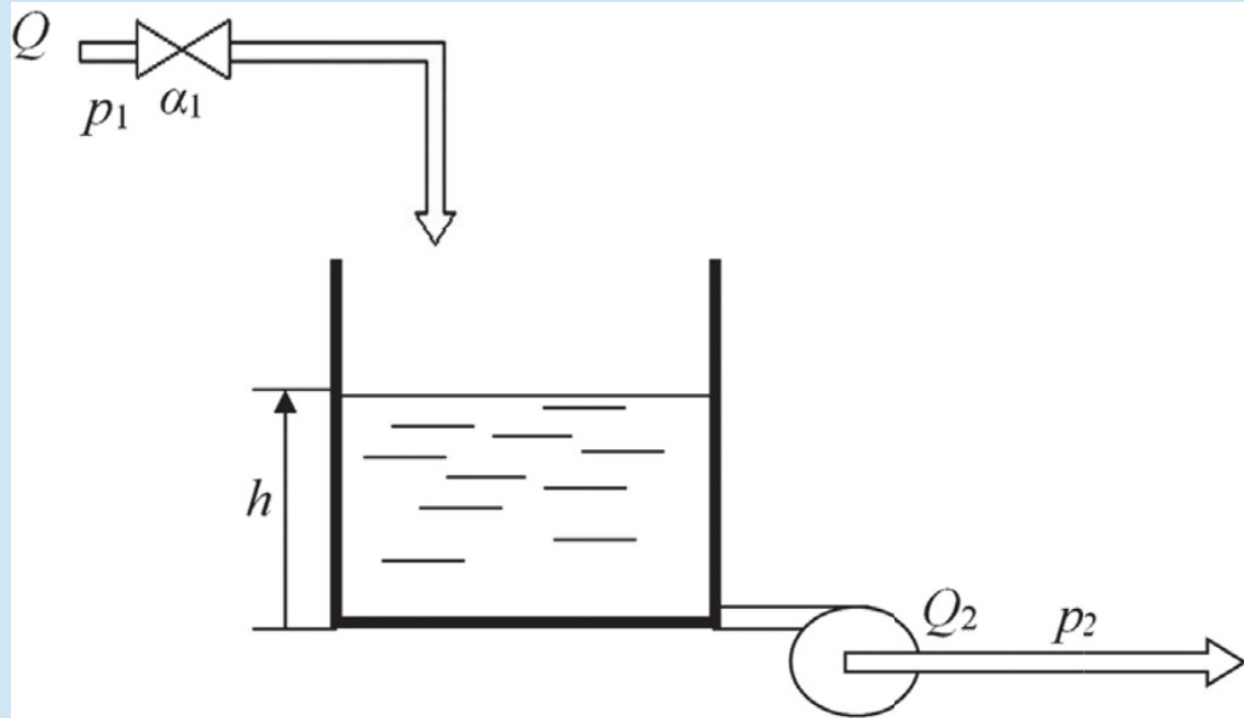
- The LSP server '/home/mfetisov/projects/SIMODO/loom/data/shell/lsp/simodo-json.json' was loaded
- The LSP server '/home/mfetisov/projects/SIMODO/loom/data/shell/lsp/simodo-lsp.json' was loaded
- The LSP server '/home/mfetisov/projects/SIMODO/loom/data/shell/lsp/simodo-stars-client.json' was loaded
- Ready
- Modeling started
- Modeling stoped

1000.0 general-text pos 0, line 1, col 1 100%

Бак с откачкой насосом

Постановка задачи

- Подключим на выходе насос
- Расход Q_2 теперь не является функцией уровня жидкости в баке
- $Q_2 = \text{const.}$



Бак с откачкой насосом

Балансовое соотношение

- *[Скорость накопления объёма вещества] = [Объёмный расход на притоке] — [Объёмный расход на стоке]*

$$S \cdot \frac{dh}{dt} = \Delta Q_1 - \Delta Q_2$$

- Объект по каждому каналу $\Delta Q_1 \rightarrow h$ и $\Delta Q_2 \rightarrow h$ оказывается интегрирующим (а статическим)
- В тех случаях, когда сток Q_2 зависит от параметров состояния объекта, объект всегда окажется с самовыравниванием, в противном случае объект астатический.

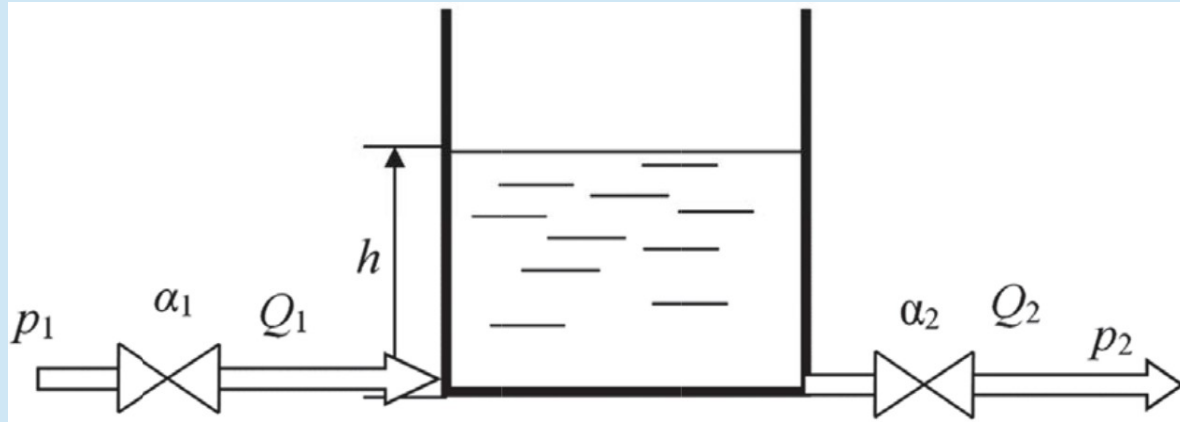
$$\frac{dh}{dt} = \frac{1}{S} \Delta Q_1$$

$$\frac{dh}{dt} = \frac{1}{S} \Delta Q_2$$

Бак с подачей снизу

Балансовое соотношение и модель

- Рассмотрим вариант процесса с подачей жидкости снизу, «под столб» жидкости



- В отличие от предыдущих вариантов, уравнение расхода через приточный вентиль $Q_1 = \alpha_1 \sqrt{p_1 - p_{\text{втек.}}}$ сведётся к виду $Q_1 = \alpha_1 \sqrt{p_1 - \rho gh}$ т. к. гидростатическое давление столба жидкости противодействует расходу жидкости на притоке
- Все дальнейшие преобразования при построении модели аналогичны рассмотренным выше.

Бак с подачей снизу

Особенность обратного тока

- Обратите внимание на появляющуюся особенность свойств модели: если давление жидкости на входе p_1 станет меньше, чем давление столба жидкости в аппарате, то под корнем будет отрицательное число и модель окажется неработоспособной, хотя физически эта ситуация должна привести к «обратному» току входящей жидкости
- Если такая ситуация предусмотрена в реальном аппарате, то модель нужно записать в виде логического выражения следующим образом:

$$Q_1 = \alpha_1 \sqrt{p_1 - \rho gh} , \text{ если } p_1 - \rho gh \geq 0,$$

$$Q_1 = -\alpha_1 \sqrt{\rho gh - p_1} , \text{ если } p_1 - \rho gh < 0.$$

Численное моделирование

SIMODO - /home/mfetisov/projects/SIMODO/loom/test/examples/mcc

File Edit Run View Window Help

Home: mcc

- модел
- хт-процессы
 - бак с подачей снизу (1).s-o...
 - бак с подачей снизу (2).s-o...
 - простой бак.s-ode
 - транспортировка жидкост...
- подача снизу.s-script
- простой бак.s-script
- транспортировка.s-script

```
1 import "модел/хт-процессы/бак с подачей снизу (1).s-
2   b = {
3     h : 0.,
4     // Q1 : 10.,
5     a1 = 1.,
6     p1 = 1.,
7     a2 : 1.,
8     p : 1.,
9     g : 1.,
10    S : 10.
11  }
12
13 import "//chart.s-script" : chart
14
15 call chart.init("Высота жидкости")
16 call chart.addSeries("h", chart.style.line)
17
18 call chart.initN("Объёмы входа-выхода", 1)
19 call chart.addSeriesN("Q1", chart.style.line, 1)
20 call chart.addSeriesN("Q2", chart.style.line, 1)
21
22 import "//scene.s-script" : scene =
23 {
24   tk : 1000.0,
25   dt : 0.1,
26   objects : [b],
27   iteration_step : 10,
28   callback : fn [chart, b, scene] () {
29     call chart.addPoint("h", scene.t, b.h)
30     call chart.addPointN("Q1", scene.t, b.Q1, 1)
31     call chart.addPointN("Q2", scene.t, b.Q2, 1)
32   }
33 }
```

Chart: Высота жидкости

Rubber band Smooth lines

Time	h
0.0	0.00
250.0	0.50
500.0	0.50
750.0	0.50
1000.0	0.50

Chart: Объёмы входа-выхода

Rubber band Smooth lines

Time	Q1	Q2
0.9	10.00	0.00
250.7	0.79	0.62
500.4	0.79	0.62
750.2	0.79	0.62
1000.0	0.79	0.62

Global messages

- The LSP server '/home/mfetisov/projects/SIMODO/loom/data/shell/lsp/simodo-lsp.json' was loaded
- The LSP server '/home/mfetisov/projects/SIMODO/loom/data/shell/lsp/simodo-stars-client.json' was loaded
- Ready
- Modeling started
- Modeling stoped
- Modeling started
- Modeling stoped

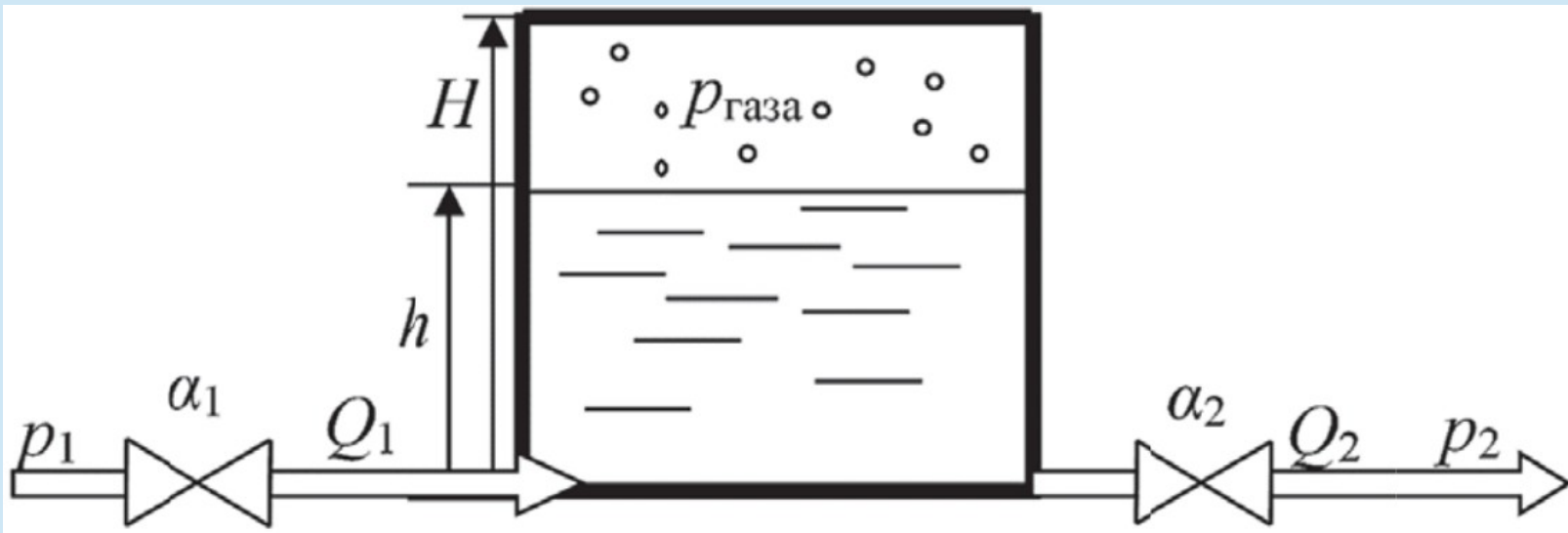
Report

1000.0 general-text pos 30, line 1, col 31 100%

Бак с крышкой

Постановка

- Рассмотрим вариант процесса с подачей жидкости снизу «под столб» жидкости в аппарат, т. е. аппарат закрыт сверху герметичной крышкой
- При подъёме уровня жидкости газ сжимается и его давление повышается



Бак с крышкой

Важные допущения

- Газ не растворяется в жидкости
- Жидкость не легколетучая, т. е. интенсивно не испаряется, и поэтому масса газа остаётся постоянной

Бак с крышкой

Балансовые соотношения

- Т.о. при любом значении h та же масса газа будет сосредоточена в объёме $S(H - h)$

- По закону Бойля-Мариотта: $pV = const$, т. е. $p_1V_1 = p_2V_2$

- $$p_{атм}SH = p_{абс.давл.газа}S(H - h)$$

- Выразим избыточное давление газа:

- $$p_{газа} = p_{атм} \frac{SH}{S(H - h)} - p_{атм} = p_{атм} \frac{h}{H - h}$$

- Обратите внимание на «безынерционность» данного выражения, т. е. при изменении h давление газа мгновенно принимает новое значение.

Бак с крышкой

Модель приход-расход

$$Q_1 = \alpha_1 \sqrt{p_1 - (\rho gh + p_{\text{газа}})} = \alpha_1 \sqrt{p_1 - \rho gh + p_{\text{атм}} h / (H - h)}$$

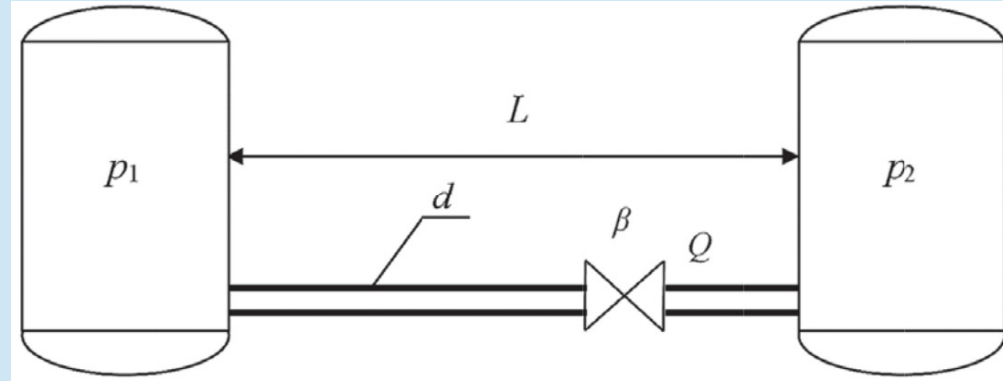
$$Q_2 = \alpha_2 \sqrt{(\rho gh + p_{\text{газа}}) - p_2} = \alpha_2 \sqrt{\rho gh + p_{\text{атм}} h / (H - h) - p_2}$$

- Далее модель выводится по аналогии и будет задана в качестве одного из заданий для ЛР.

Транспортировка жидкости

Постановка задачи

- Рассмотрим процесс перемещения технологической жидкости между двумя аппаратами с различным давлением
- Примем для определённости $p_1 > p_2$ (жидкость течёт слева направо):
 - d — диаметр трубопровода;
 - L — его длина;
 - β — условно сосредоточенное сопротивление линии, которое включает сопротивление движению по ходу трубопровода (изгибы в горизонтальной плоскости, трения о стенки и пр.) и сопротивление регулирующего органа.



Транспортировка жидкости

Важные допущения

- Трубопровод расположен горизонтально, т. е. Течение происходит только за счёт разности давлений
- Жидкость несжимаема, т. е. $\rho = \text{const}$
- Сечение потока постоянно $S = \text{const}$
- Поток заполняет весь трубопровод

Транспортировка жидкости

Балансовые соотношения и модель (статика)

- Условие **стационарного течения потока** сводится к равенству движущей силы и силы сопротивления движению:

$$[\text{Движущая сила}] = [\text{Сила сопротивления}],$$

$$F_{\text{движ.}} - F_{\text{сопр.}} = 0.$$

$$F_{\text{движ.}} = S(p_1 - p_2) - \text{движущая сила.}$$

- Сила сопротивления зависит от гидравлического сопротивления, скорости движения, положения регулирующих органов.
- С учётом допущений на скорости:

$$F_{\text{сопр.}} = \beta v^2$$

$$v = \frac{Q}{S}$$

$$F_{\text{сопр.}} = \beta \left(\frac{Q}{S} \right)^2$$

Транспортировка жидкости

Балансовые соотношения (динамика)

- Модель **динамики** выводится на основании баланса количества движения, т. к. материальный баланс соблюдается всегда за счёт полностью заполненного трубопровода, а перемещать с ускорением приходится всю массу жидкости в трубопроводе
- При изменении давления или сопротивления баланс количества движения в динамике:

*[Скорость изменения количества движения] = [Движущая сила] –
– [Сила сопротивления],*

$$\frac{d(mv)}{dt} = F_{\text{движ.}} - F_{\text{сопр.}}$$

Транспортировка жидкости

Модель динамики и расход

- Масса жидкости m определяется путём перемножения всего объёма жидкости в трубе на её плотность ρ :

- $$\frac{d(mv)}{dt} = F_{\text{движ.}} - F_{\text{сопр.}} \rightarrow LS\rho \frac{dv}{dt} = S(p_1 - p_2) - \frac{\beta}{S^2} Q^2$$

- Перейдём к расходу (часто измеряется как технологический параметр процесса):

$$L\rho \frac{dQ}{dt} + \frac{\beta}{S^2} Q^2 = S(p_1 - p_2)$$

Численное моделирование

SIMODO - /home/mfetisov/projects/SIMODO/loom/test/examples/mcc

File Edit Run View Window Help

Home: mcc

- модел
- хт-процессы
 - бак с подачей снизу (1).s-o...
 - бак с подачей снизу (2).s-o...
 - простой бак.s-ode
 - транспортировка жидкост...
- подача снизу.s-script
- простой бак.s-script
- транспортировка.s-script

Global messages

- Modeling stoped
- Modeling started
- Modeling stoped
- Reusing: /home/mfetisov/projects/SIMODO/loom/test/examples/mcc/модел/хт-процессы/бак с подачей снизу (1).s-ode
- Modeling started
- Modeling stoped
- Modeling started
- Modeling stoped
- Modeling started
- Modeling stoped

```
1 import "модел/хт-процессы/транспортировка жидкости.s-script"
2   b = {
3     Q : 0.,
4     S : 10.,
5     p1 : 20.,
6     p2 : 10.,
7     p : 1.,
8     L : 10.,
9     b : 1.,
10  }
11
12 import "//chart.s-script" : chart
13
14 call chart.init("Поток жидкости")
15 call chart.addSeries("Q", chart.style.line)
16
17 import "//scene.s-script" : scene =
18 {
19   tk : 100.0,
20   dt : 0.01,
21   objects : [b],
22   iteration_step : 10,
23   callback : fn [chart, b, scene] () {
24     call chart.addPoint("Q", scene.t, b.Q)
25   }
26 }
27
28 call scene.start()
29
30
```

Chart: Поток жидкости

Rubber band Smooth lines

Time (t)	Flow (Q)
0.0	0.0
5.0	10.0
10.0	40.0
15.0	70.0
20.0	90.0
25.0	98.0
30.0	100.0
40.0	100.0
50.0	100.0
60.0	100.0
70.0	100.0
80.0	100.0
90.0	100.0
100.0	100.0

100.0 general-text pos 546, line 29, col 1 100%

Аналитические методы построения моделей химико-технологического процесса

Выводы

- Мы разобрали простые модели устройств химико-технологических процессов
- Подобным образом начинают строить подробные модели устройств
- Подробные модели имеют ещё больше ограничений
- Из подобных моделей устройств собирают модель производства и достаточно полные модели производства
- Мы не рассмотрели экспериментальные методы построения моделей
- Не рассмотрели переходные процессы в средах, превращения веществ и многие особенности построения моделей химико-технологических процессов

Вопросы?

Фетисов Михаил Вячеславович
fetisov.michael@bmstu.ru
fetisov.michael@yandex.ru