

СТАТИСТИЧНЕ КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ СХЕМ

Тесенчук А. О., Шахновський А. М., Яновець Н. О.

СТАТИСТИЧЕСКОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СХЕМ

Тесенчук А. А., Шахновский А. М., Яновец Н. О.

STATISTICAL COMPUTER SIMULATION OF CHEMICAL ENGINEERING PROCESSES

Teshenchuk A., Shakhnovsky A., Yanovets N.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Київ, Україна
kxtp@kpi.ua

Статтю присвячено питанням комп'ютерного моделювання процесу функціонування хіміко-технологічних процесів в умовах невизначеності. Обґрунтовано процедуру комп'ютерного моделювання, що включає побудову комп'ютерної моделі у програмі-симуляторі, і застосування методу статистичних випробувань. Представлену процедуру проілюстровано прикладами.

Ключові слова: комп'ютерне моделювання, невизначеність умов, випадкова величина, статистичні випробування

Статья посвящена вопросам компьютерного моделирования процесса функционирования химико-технологических процессов в условиях неопределенности. Обоснована процедура компьютерного моделирования, включая построение компьютерной модели в программе-симуляторе, и применение метода статистических испытаний. Представленная процедура проиллюстрирована примерами.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, неопределенность условий, случайная величина, статистические испытания

The paper addresses the computer simulation of the chemical engineering process uncertainty conditions. The computer simulation procedure was substantiated, which include building of computer model in the simulator program, and the application of the Monte-Carlo method. The presented procedure was illustrated by examples.

Keywords: computer simulation, uncertainty of conditions, random variable, statistical tests

Сучасне промислове виробництво – складна ієрархічна система, що складається із значної кількості елементів, сполучених технологічними та інформаційними зв'язками і функціонує в умовах невизначеності зовнішнього і внутрішнього середовища (випадкової зміни умов та параметрів процесів,

кон'юнктури ринку, і т.п.). З цих причин для сучасного промислового виробництва характерні труднощі із «прогнозом стану» – передбачення реальних величин якості продукції, додержання нормативних (міжремонтних) періодів експлуатації, тощо [1]. Складність передбачення поведінки технологічної системи, у свою чергу, спричиняє погіршення керованості таких систем, ускладнення роботи операторів, технологів у процесі експлуатації системи. Запобігти (ще на етапі проектування) такого роду проблемам дозволяють статистичні підходи на основі комп'ютерного моделювання. Під комп'ютерним моделюванням тут розуміємо метод дослідження, за якого система, що вивчається, замінюється реалізованою у комп'ютерному представленні моделлю, на якій у подальшому проводяться експерименти з метою отримання інформації про вихідний об'єкт [2]. Таким чином, організація комп'ютерного моделювання передбачає наявність: а) адекватної комп'ютерної моделі; б) стратегії оперування моделлю.

У процесі побудови «класичних» математичних моделей складних динамічних систем (у вигляді множини рівнянь математичного опису) автори зіткнулися із загальновідомими проблемами: складність організації модельованого об'єкту не дозволяє побудувати адекватну модель, яка враховує всі фактори; відсутній надійний алгоритм вирішення складеного математичного опису, та ін. В цих умовах для створення комп'ютерної моделі може бути використано апарат систем масового обслуговування [3], мереж Петрі [4], теорії скінченних автоматів [5], тощо. У даному випадку як засіб моделювання було обрано ефективні засоби комп'ютерного моделювання – так звані стимулятори хімічних виробництв [6]. Вказані спеціалізовані програмні засоби (ChemCAD, Hysys, Aspen Plus, тощо) крім комп'ютерних моделей процесів та обладнання включають бази властивостей речовин, засоби термодинамічних розрахунків та ін.

У свою чергу, стратегія використання комп'ютерної моделі з метою прийняття рішень може передбачати «дискретно-подієве» моделювання та застосування «методів системної динаміки» [7], побудову і вирішення оптимізаційної задачі стохастичного програмування [8], тощо. Вищеназвані проблеми із побудовою математичної моделі обумовили вибір авторами у якості «стратегії оперування моделлю» методу статистичного комп'ютерного моделювання (статистичних випробувань). Застосування методу статистичних випробувань передбачало такі кроки:

- виділення каналів «вхід-вихід» у комп'ютерній моделі;
- представлення факторів впливу («входи») і характеристик якості («виходи») як випадкових величин;
- власне статистичне моделювання шляхом подачі за каналами «вхід-вихід» розподілених за заданим статистичним законом випадкових значень;
- статистична обробка результатів випробувань.

Раніше авторами було апробовано загальний алгоритм методу статистичних випробувань (із створенням відповідного програмного забезпечення) та досліджено можливості застосування цього алгоритму до хіміко-технологічного процесу виробництва етилбензолу.

У представленій роботі в якості засобу для реалізації комп'ютерних моделей було використано середовище ChemCAD. Процес комп'ютерного моделювання включав: а) побудову комп'ютерної моделі процесу у ChemCAD; б) вивчення

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ТА БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ

поведінки хіміко-технологічної схеми в умовах випадкової зміни параметрів функціонування.

Зокрема, застосовуючи описану процедуру при дослідженні процесу виробництва циклогексанону, автори на першому етапі побудували мнемонічну схему процесу (рис. 1, а), а потім (у середовищі моделювання ChemCAD) – комп'ютерну модель на її основі (рис. 1, б).

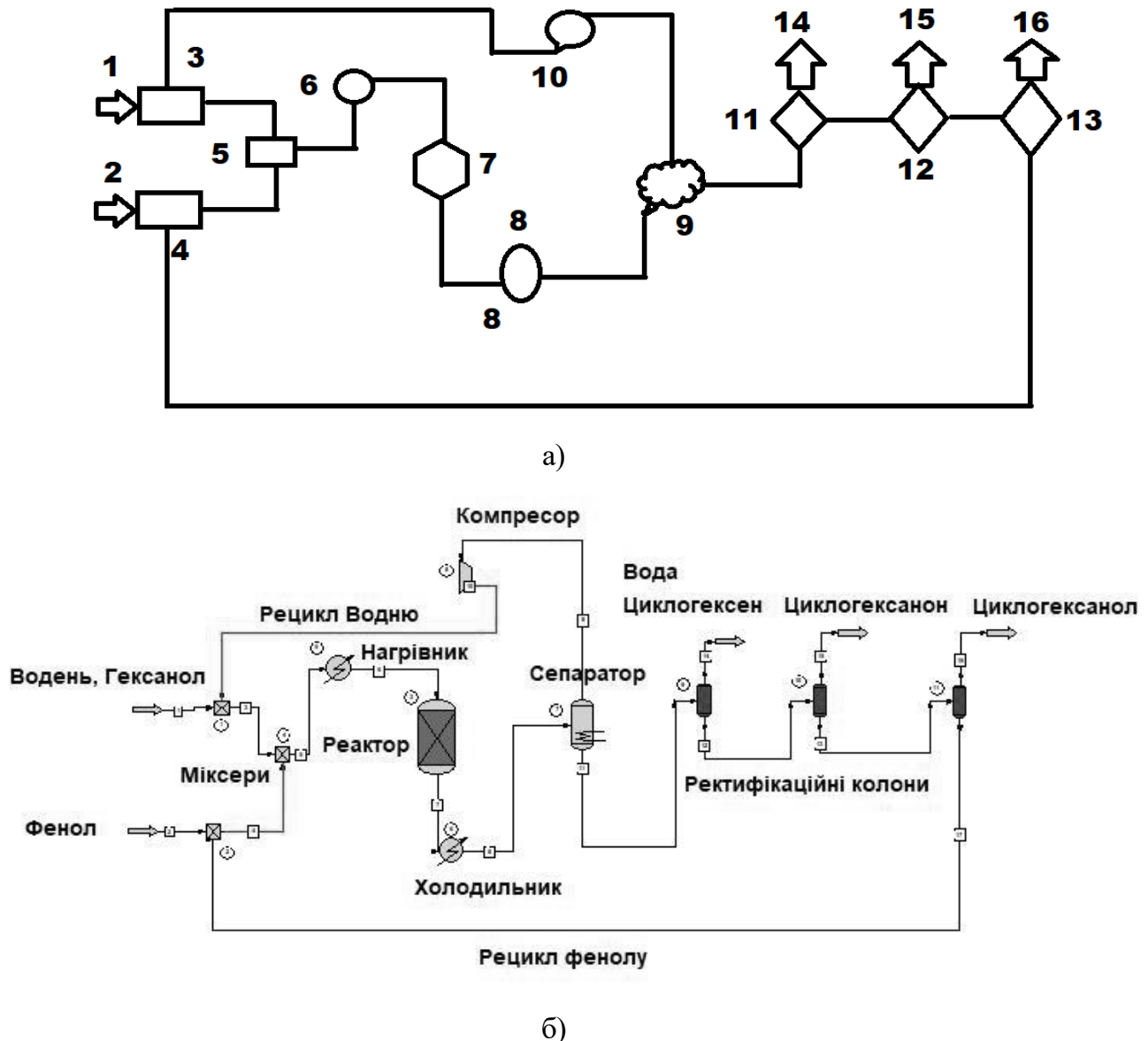


Рис. 1. Комп'ютерне моделювання процесу синтезу циклогексанону:

а) мнемонічна схема процесу;

б) комп'ютерна модель процесу (моделююча програма ChemCAD);

1, 2 – вхідні потоки; 3, 4, 5- змішувачі потоків; 6, 8 – апарати зміни температури;

7 – хімічний реактор; 9 – дільник потоків; 10 – насосне обладнання;

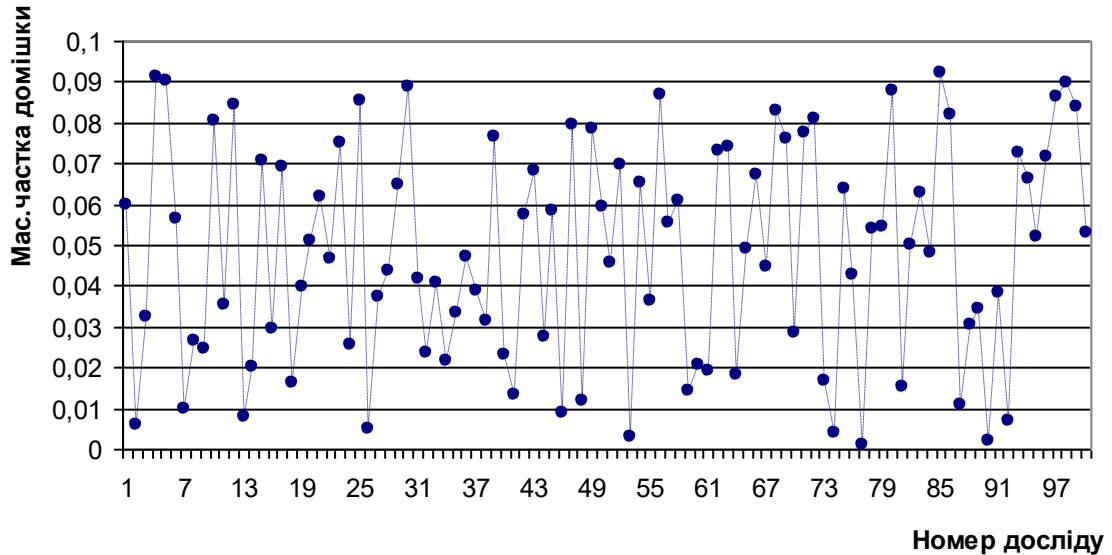
11, 12, 13 – покомпонентні дільники потоків (масообмінні апарати);

14, 15, 16 – потоки на виході

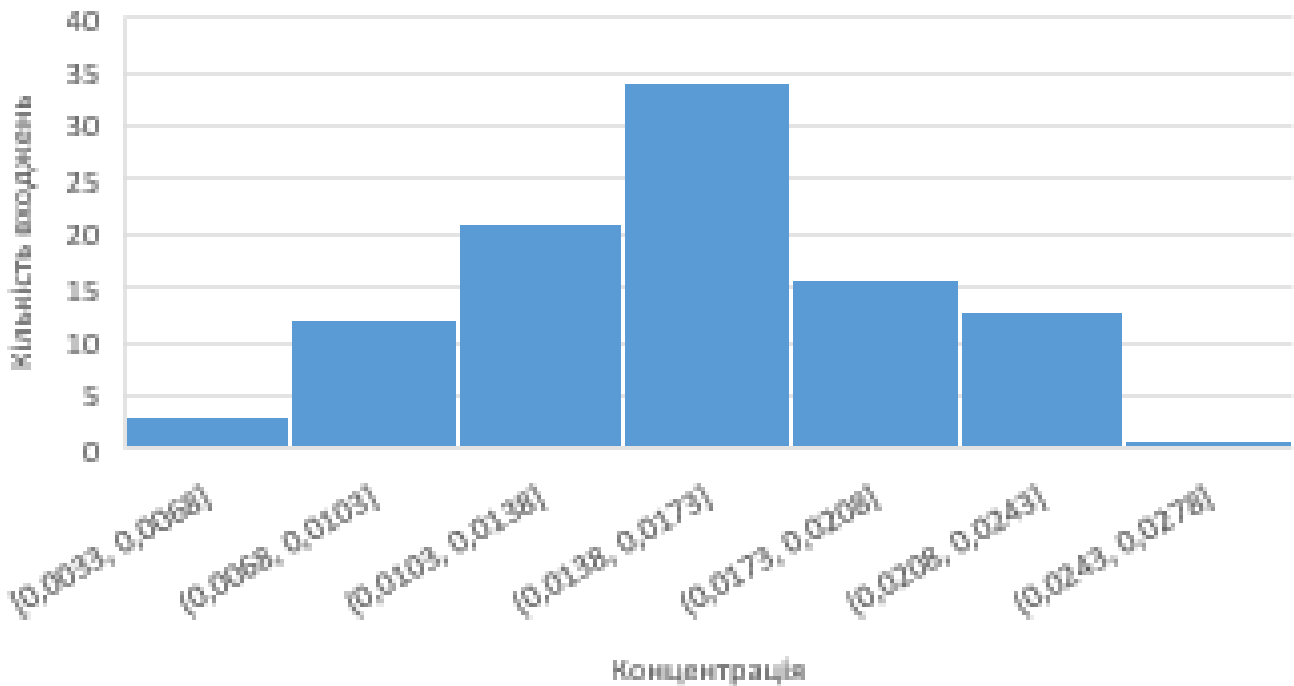
Для реалізації методу статистичних випробувань було задано діапазон зміни випадкової «вхідної» величини і параметри її розподілу. Зокрема, розглянуто вплив

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ТА БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ

масової частки домішки (сірки) у сировині – на вихід продукту. У відповідності до описаного вище підходу із використанням генератора псевдовипадкових чисел було створено множину випадкових нормально розподілених значень вмісту домішки у потоці на вході схеми (рис. 2).



а)



б)

Рис. 2. Множина випадкових значень вмісту домішки у потоці на вході схеми процесу синтезу циклогексанону:
а) негруповані дані;
б) груповані дані (гістограма частот)

Далі було здійснено серію розрахунків, яка дала оцінку основних статистичних характеристик «величини на виході» (вибіркове середнє, дисперсія, і т.д.), а також гістограму статистичного розподілу, що дає поняття про вид цього розподілу (рис. 3).

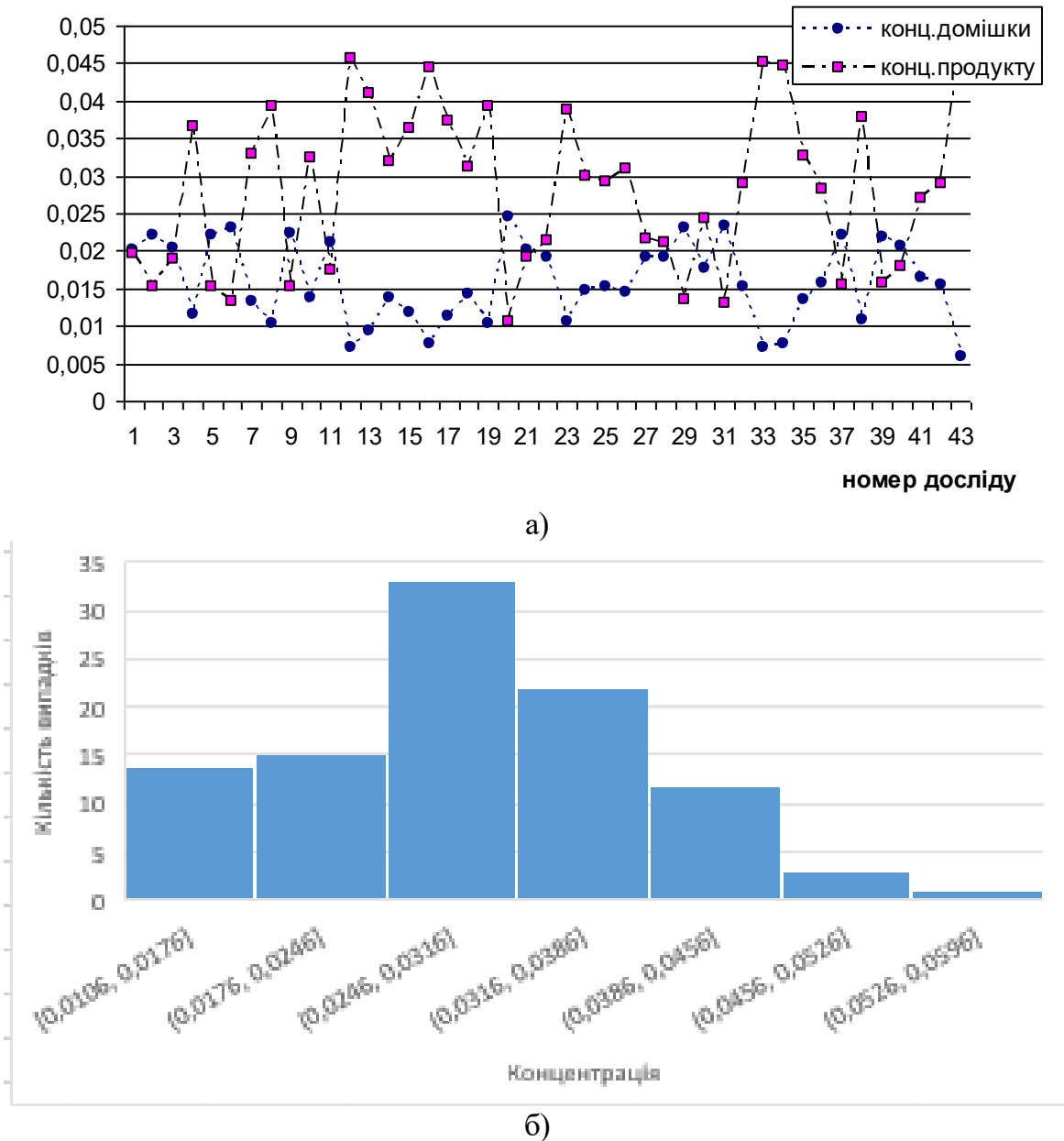


Рис. 3. Результати статичних випробувань – вплив домішок у вхідному потоці на вихід циклогексанону:

- а) негруповані дані (фрагмент);
- б) груповані дані (гістограма частот)

За даними досліджень можна зробити практичні висновки, зокрема про те, що попереднє очищення сировини (фенолу) призведе до збільшення виходу основного продукту.

Застосований у даній роботі підхід до комп'ютерного моделювання процесу функціонування хіміко-технологічних процесів в умовах невизначеності відповідає загальним тенденціям застосування комп'ютерного симулятора MathCAD (у якому відсутні потужні засоби моделювання динаміки систем) для дослідження нестационарних режимів функціонування хіміко-технологічних процесів [9]. Проте саме застосування методу статистичних випробувань дає змогу судити про параметри процесу функціонування хіміко-технологічних процесів в умовах невизначеності.

Наступне вдосконалення запропонованої процедури пов'язане, насамперед, із автоматизацією стадії статистичного аналізу результатів розрахунків.

Література

1. Сильвестрова А. С. Проектирование оптимальных ХТС на основе двухэтапных задач оптимизации [Текст] / А. С. Сильвестрова, Т. В. Лаптева, Н. Н. Зиятдинов, Н. Н. Закиров // Вестник Казанского технологического университета. – т. 18. – №23, 2015. – с. 110-115.
2. Немтинова Ю. В. Имитационное моделирование технологических процессов химических производств [Текст] / Ю. В. Немтинова, А. А. Пчелинцева, А. А. Бубнов // Вестник Тамбовского государственного технического университета. – 2011. – Том 17. – № 2. – с. 449 – 452.
3. Романишена И. В. Разработка имитационной модели виртуального издательско-полиграфического предприятия [Текст] / И. В. Романишена, Т. А. Колесникова // Системи обробки інформації, 2016, випуск 2 (139). – С. 169 – 173.
4. Кузьмук В. В. Оценочные управляющие сети Петри [Текст] / В. В. Кузьмук, О. О. Супруненко, А. В. Кузьмук // Управління розвитком складних систем. – 2012. – № 8. – С. 25 – 27.
5. Казаненко М. Д. Применение теории конечных автоматов при моделировании сложных систем с использованием программы STATEFLOW [Текст] / М. Д. Казаненко // Горный информационно-аналитический бюллетень (научно-технический журнал). – 2015. – №1. – С. 389 – 392
6. Гартман Т. Н. Аналитический обзор современных пакетов моделирующих программ для компьютерного моделирования химико-технологических систем [Текст] / Т. Н. Гартман, Ф. С. Советин // Успехи в химии и химической технологии. – 2012. – Т. 26. № 11 (140). – С. 117-120.
7. Лысенко А. В. Краткий обзор методов имитационного моделирования [Текст] / А. В. Лысенко, Н. В. Горячев, И. Д. Граб, Б. К. Кемалов, Н. К. Юрков // Современные информационные технологии. – 2011. – № 14. – С. 171-176.
8. Бойко Т. В. Моделювання і оптимізація процесу цементації ртуті в умовах статистичної невизначеності [Текст] / Т. В. Бойко, Д. М. Складанний, Т. Є. Потапенко // Вісник Вінницького політехнічного інституту. – 2017. – № 6. – С. 21 – 25
9. Gupta V. S. Solving unsteady state problems with ChemCAD, a steady state process simulator [Text] / Vishnu S. Gupta, Nathan D. Massey // AIChE-1995 Spring meeting. – March 19-23, 1995. New York: American Institute of Chemical Engineers, 1995. – Paper no.: 15a