

Министерство образования и науки Российской Федерации
Нижекамский химико-технологический институт (филиал)
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего профессионального образования
«Казанский национальный исследовательский технологический университет»

В.В. Елизаров

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ
АВТОМАТИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ**

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

**Нижекамск
2012**

УДК 681.5
Е 51

Печатается по решению редакционно-издательского совета Нижнекамского химико-технологического института (филиала) ФГБОУ ВПО «КНИТУ».

Рецензенты:

Фафурин А.В., д.т.н., проф. каф. АССОИ ФГБОУ ВПО «КНИТУ»;

Галеев Э.Р., к.т.н., доц. каф. АТПП НХТИ ФГБОУ ВПО «КНИТУ».

Елизаров, В.В.

Е 51 Моделирование систем автоматизации технологических процессов : учебное пособие / В.В. Елизаров. – Нижнекамск : Нижнекамский химико-технологический институт (филиал) ФГБОУ ВПО «Казанский национальный исследовательский технологический университет», 2012. – 128 с.

Пособие соответствует требованиям федеральных государственных образовательных стандартов направлений бакалаврской подготовки 220400 «Управление в технических системах», 220700 «Автоматизация технологических процессов и производств», 230100 «Информатика и вычислительная техника».

Пособие содержит краткое описание, математические модели, а также алгоритмы автоматизации теплообменных, массообменных и реакционных аппаратов. Представлены экспериментально-статистические методы составления математического описания. Приведены задания курсовой работы построения систем автоматизации процессов химической технологии с помощью методов математического моделирования.

Предназначено для студентов факультета управления и автоматизации, изучающих дисциплины «Моделирование систем», «Моделирование систем управления», «Моделирование систем и процессов».

Подготовлено на кафедре автоматизации технологических процессов и производств Нижнекамского химико-технологического института (филиала) ФГБОУ ВПО «Казанский национальный исследовательский технологический университет».

УДК 681.5

© Елизаров В.В., 2012

© Нижнекамский химико-технологический институт (филиал) ФГБОУ ВПО «КНИТУ», 2012

СОДЕРЖАНИЕ

Введение	5
I. Моделирование системы автоматизации теплообменным процессом	6
План выполнения работы.....	6
Краткое описание процесса.....	7
Математическое описание теплообменного процесса.....	9
Управление динамическими режимами работы теплообменного аппарата.....	17
Построение функциональной схемы автоматизации.....	21
Варианты заданий 1а – 1г.....	23
Варианты заданий 1д – 1з.....	25
II. Моделирование системы автоматизации процессом абсорбции	28
План выполнения работы.....	28
Краткое описание процесса.....	29
Математическое описание процесса абсорбции.....	30
Регулирование состава очищенного газа на выходе абсорбционной установки.....	36
Построение функциональной схемы автоматизации.....	37
Варианты заданий 2а – 2д.....	39
III. Моделирование системы автоматизации процессом ректификации	41
План выполнения работы.....	41
Краткое описание процесса.....	42
Математическое описание процесса ректификации.....	43
Расчет управляющих параметров процесса ректификации в заданной области изменения состояний входа.....	48
Построение функциональной схемы автоматизации.....	51
Варианты заданий 3а – 3д.....	52
IV. Моделирование системы автоматизации реакционным процессом	54
План выполнения работы.....	54

Основные определения процесса, классификация химических реакторов.....	55
Основные понятия химической кинетики.....	60
Математическая модель химического реактора.....	69
Расчет управляющих параметров реакционной установки.....	73
Построение функциональной схемы автоматизации.....	75
Варианты заданий 4а – 4д.....	77
V. Моделирование системы автоматизации с применением экспериментально-статистических методов моделирования.....	81
План выполнения работы.....	81
Описание экспериментально-статистических методов.....	82
Применение экспериментально-статистических методов в задачах управления.....	106
Построение функциональной схемы автоматизации.....	107
Варианты заданий 5а – 5д.....	109
Библиографический список.....	116
Приложение I. Правила построения условных обозначений приборов и средств автоматизации.....	118
Приложение II. Критические значения коэффициента Стьюдента (t-критерия) для различных значений уровня значимости p и числа степеней свободы f.....	124
Приложение III. Значения критерия Фишера (F-критерия) для уровня значимости $p = 0.05$.....	126
Приложение IV. Значения критерия Фишера (F-критерия) для уровня значимости $p = 0.01$.....	127
Приложение V. Содержание отчета по курсовой работе.....	128

ВВЕДЕНИЕ

Современное нефтехимическое производство – это комплекс химико-технологических стадий, информационных систем управления и коммуникаций, планово-экономических и маркетинговых служб, научно-технологических и проектных центров. Все более возрастающее значение в процессе функционирования нефтехимического комплекса приобретают информационные системы управления и передачи данных, что объясняется интенсивным развитием цифровой техники и способов обработки информации. В этой связи весьма целесообразно применение методов математического моделирования в решении задач анализа и синтеза химико-технологических процессов (ХТП), а также в задачах построения систем управления данными процессами.

Математическое моделирование является эффективным инструментом определения оптимальных управляющих параметров, особенно в случае процессов, физические и химические закономерности которых достаточно изучены. При этом определение управляющих параметров может осуществляться путем расчета математической модели объекта в широком диапазоне внешних возмущений. Среди методов разработки математических моделей следует выделить:

- аналитические, в основе которых используются фундаментальные законы сохранения субстанции;
- экспериментальные и экспериментально-аналитические, как правило, предполагающие проведение статистической обработки экспериментальных данных о состоянии входа и выхода исследуемого объекта.

Владение навыками составления математического описания, а также знание моделей ХТП могут быть весьма эффективными и полезными прежде всего для операторов, инженеров и специалистов в области управления и автоматизации технологических процессов.

I. МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗАЦИИ ТЕПЛООБМЕННЫМ ПРОЦЕССОМ

План выполнения работы

1. *Изучение теплообменного процесса:*
 - основные определения и закономерности;
 - математическая модель;
 - расчет коэффициентов теплоотдачи, теплопередачи;
 - алгоритм расчета динамики процесса.
2. *Постановка задачи моделирования в соответствии с заданием на курсовую работу.*
3. *Получение уравнений динамики процесса.*
4. *Разработка моделирующей программы:*
 - алгоритм расчета динамического режима работы теплообменника;
 - код моделирующей программы.
5. *Анализ и представление результатов моделирования.*
6. *Анализ теплообменного процесса с точки зрения задач управления.*
7. *Построение функциональной схемы автоматизации объекта.*
8. *Разработка презентации курсовой работы (не более 8 слайдов, в т.ч. постановка задачи, математическая модель процесса, алгоритмы расчета, результаты моделирования и др.).*
9. *Подготовка доклада к защите (длительность доклада не более 3-4 мин.).*

Рекомендуемая литература: [1 – 7].

Краткое описание процесса

Перенос энергии в форме тепла, происходящий между телами, имеющими различную температуру, называется *теплообменом* [1]. Движущей силой любого процесса теплообмена является разность температур более нагретого и менее нагретого тел, при наличии которой тепло самопроизвольно, в соответствии со вторым законом термодинамики, переходит от более нагретого к менее нагретому телу.

Различают три принципиально различных элементарных способа распространения тепла: теплопроводность, конвекцию и тепловое излучение. *Теплопроводность* представляет собой перенос тепла вследствие беспорядочного (теплого) движения микрочастиц, непосредственно соприкасающихся друг с другом. *Конвекцией* называется перенос тепла вследствие движения и перемешивания макроскопических объемов газа или жидкости. *Тепловое излучение* – это процесс распространения электромагнитных колебаний с различной длиной волн, обусловленный тепловым движением атомов или молекул излучающего тела.

В реальных условиях тепло передается не каким-либо одним из указанных выше способов, а комбинированным путем. Например, при теплообмене между твердой стенкой и газовой средой тепло передается одновременно конвекцией, теплопроводностью и излучением.

Перенос тепла от стенки к газообразной (жидкой) среде или в обратном направлении называется *теплоотдачей*. Еще более сложным является процесс передачи тепла от более нагретой к менее нагретой жидкости (газу) через разделяющую их поверхность или твердую стенку. Этот процесс носит название *теплопередачи*.

В непрерывно действующих аппаратах температуры в различных точках не изменяются во времени и протекающие процессы теплообмена являются *установившимися* (стационарными). В периодически действующих аппаратах, где температуры

меняются во времени (при нагревании или охлаждении), осуществляются *неустановившиеся*, или нестационарные, процессы теплообмена.

В химической промышленности широко распространены тепловые процессы – нагревание и охлаждение жидкостей, конденсация паров, испарение жидкостей, которые проводятся в теплообменных аппаратах, называемых *теплообменниками*. Теплообменники предназначены для передачи тепла от одних веществ к другим. Вещества, участвующие в процессе передачи тепла, называются *теплоносителями*. Теплоносители, имеющие более высокую температуру принято называть *нагревающими агентами*, а теплоносители с более низкой температурой, чем среда, от которой они воспринимают тепло, – *охлаждающими агентами*.

В зависимости от способа передачи тепла различают две основные группы теплообменников:

1) *поверхностные теплообменники*, в которых перенос тепла между обменивающимися телом веществами происходит через разделяющую их поверхность теплообмена – глухую стенку;

2) *теплообменники смешения*, в которых тепло передается от одной среды к другой при их непосредственном соприкосновении.

Поверхностные теплообменники широко распространены и их конструкции весьма разнообразны [2]. На рис. 2.1 показан кожухотрубчатый теплообменник жесткой конструкции, который состоит из корпуса, или кожуха 1, и приваренных к нему трубных решеток 2. В трубных решетках закреплен пучок труб 3. К трубным решеткам крепятся крышки 4. В теплообменнике одна из сред I движется в межтрубном пространстве, а другая II – внутри труб (в трубном пространстве). Среды обычно направляют противотоком друг к другу. При этом нагреваемую среду направляют снизу вверх, а среду, отдающую тепло, – в

противоположном направлении. Такое направление движения каждой среды совпадает с направлением, в котором стремится двигаться данная среда под влиянием изменения ее плотности при нагревании или охлаждении.

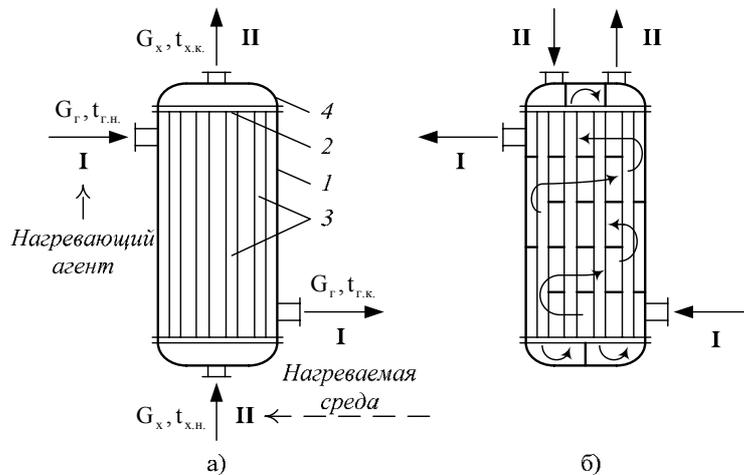


Рис. 1.1. Кожухотрубный одноходовой (а) и многоходовой (б) теплообменники

Расчет теплообменника с известной поверхностью теплопередачи заключается, как правило, в определении конечных температур теплоносителей при их известных начальных значениях, а также в определении требуемых расходов нагревающего или охлаждающего агентов.

Математическое описание теплообменного процесса

Расчет тепловой нагрузки

Согласно основному уравнению теплопередачи *тепловой поток Q (расход передаваемой теплоты, тепловая нагрузка)* определяется следующим образом:

$$Q = FK\Delta t_{cp}, \quad (1.1)$$

где F – поверхность теплопередачи (m^2), K – коэффициент теп-

лопередачи ($\text{Вт}/(\text{м}^2 \cdot \text{К})$), Δt_{cp} – средний температурный напор (средняя движущая сила) (К).

Тепловую нагрузку Q при известных значениях расхода и теплофизических свойств теплоносителей можно рассчитать следующим образом:

1) если агрегатное состояние одного из теплоносителей не меняется, то

$$Q = Gc(t_n - t_k) \text{ или } Q = Gc(t_k - t_n), \quad (1.2)$$

где G – расход теплоносителя (кг/с), c – удельная теплоемкость теплоносителя ($\text{Дж}/(\text{кг} \cdot \text{град})$) при средней температуре

$$t = \frac{t_n + t_k}{2}$$

t_n , t_k – начальная и конечная температуры (К);

2) при конденсации насыщенных паров без охлаждения конденсата или при кипении

$$Q = Gr, \quad (1.3)$$

здесь r – теплота конденсации ($\text{Дж}/\text{кг}$);

3) при конденсации перегретых паров с охлаждением конденсата

$$Q = G(I_n - ct_k), \quad (1.4)$$

где I_n – энтальпия (теплосодержание) пара ($\text{Дж}/\text{кг}$).

Один какой-либо технологический параметр, не указанный в исходном задании (расход одного из теплоносителей или одна из температур), можно найти с помощью уравнения теплового баланса, приравнявая правые части уравнений (1.2) – (1.4) для горячего и холодного теплоносителей.

В аппаратах с прямо- и противоточным движением теплоносителей средняя разность температур потоков Δt_{cp} определяется как среднелогарифмическая между большей Δt_6 и меньшей Δt_m разностями температур теплоносителей на концах аппарата:

$$\Delta t_{\text{cp}} = \Delta t_{\text{cp.лог.}} = \frac{\Delta t_{\text{г}} - \Delta t_{\text{м}}}{\ln(\Delta t_{\text{г}}/\Delta t_{\text{м}})}. \quad (1.5)$$

Если разности температур одинаковы или отличаются не более чем в два раза, то среднюю разность температур можно приближенно определить как среднеарифметическую:

$$\Delta t_{\text{cp}} = \frac{(\Delta t_{\text{г}} + \Delta t_{\text{м}})}{2}. \quad (1.5a)$$

В многоходовых теплообменниках с простым смешанным током Δt_{cp} можно рассчитать по формуле:

$$\Delta t_{\text{cp}} = \Delta t_{\text{cp.лог.}} = \frac{A}{\ln \frac{\Delta t_{\text{г}} + \Delta t_{\text{м}} + A}{\Delta t_{\text{м}} + \Delta t_{\text{г}} - A}}, \quad (1.5б)$$

$$A = \sqrt{\delta t_{\text{г}} + \delta t_{\text{х}}}, \quad \delta t_{\text{г}} = t_{\text{г.н.}} - t_{\text{г.к.}}, \quad \delta t_{\text{х}} = t_{\text{х.к.}} - t_{\text{х.н.}},$$

где $t_{\text{г.н.}}$, $t_{\text{г.к.}}$ – начальная и конечная температура горячего теплоносителя; $t_{\text{х.н.}}$, $t_{\text{х.к.}}$ – начальная и конечная температура холодного теплоносителя; $\delta t_{\text{г}}$, $\delta t_{\text{х}}$ – изменение температур.

При изменении агрегатного состояния теплоносителя его температура постоянна вдоль всей поверхности теплопередачи и равна температуре кипения (или конденсации), зависящей от давления, состава теплоносителя.

Коэффициент теплопередачи K , входящий в уравнение (1.1), можно рассчитать с помощью уравнения аддитивности термических сопротивлений на пути теплового потока:

$$K = \left(\frac{1}{\alpha_1} + \frac{\delta_{\text{ст}}}{\lambda_{\text{ст}}} + \frac{1}{\alpha_2} + r_1^3 + r_2^3 \right)^{-1}, \quad (1.6)$$

где α_1 , α_2 – коэффициенты теплоотдачи со стороны теплоносителей; $\lambda_{\text{ст}}$ – теплопроводность стенки (Вт/(м·К)); $\delta_{\text{ст}}$ – толщина стенки (м); r_1^3 , r_2^3 – термические сопротивления загрязнений с обеих сторон стенки ((м²·К)/Вт) [3, 4].

Составление уравнения теплового баланса

Решение задач управления, синтеза и анализа теплообменных процессов методами математического моделирования предполагает использование уравнения теплового баланса:

приход тепла = расход тепла (статическая модель);

накопление тепла = приход тепла – расход тепла (динамическая модель).

Пусть задан расход более нагретого теплоносителя G_{Γ} , его энтальпия на входе аппарата $I_{\Gamma,н.}$ и на выходе из аппарата $I_{\Gamma,к.}$. Соответственно расход более холодного теплоносителя – G_{χ} , его начальная энтальпия $I_{\chi,н.}$ и конечная – $I_{\chi,к.}$. Тогда уравнение теплового баланса для установившегося (неизменного во времени) режима [1]:

$$Q = G_{\Gamma} (I_{\Gamma,н.} - I_{\Gamma,к.}) = G_{\chi} (I_{\chi,к.} - I_{\chi,н.}). \quad (1.7)$$

Если теплообмен протекает без изменения агрегатного состояния теплоносителей, то энтальпии последних равны произведению теплоемкости c на температуру t (°C):

$$\begin{aligned} I_{\Gamma,н.} &= c_{\Gamma,н.} t_{\Gamma,н.}, & I_{\Gamma,к.} &= c_{\Gamma,к.} t_{\Gamma,к.}; \\ I_{\chi,н.} &= c_{\chi,н.} t_{\chi,н.}, & I_{\chi,к.} &= c_{\chi,к.} t_{\chi,к.}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Величины $c_{\Gamma,н.}$ и $c_{\Gamma,к.}$ представляют собой средние удельные теплоемкости более нагретого теплоносителя в пределах изменения температур от 0 до $t_{\Gamma,н.}$ (на входе в аппарата) и до $t_{\Gamma,к.}$ (на выходе из аппарата) соответственно; $c_{\chi,н.}$ и $c_{\chi,к.}$ – средние удельные теплоемкости холодного теплоносителя в пределах 0 – $t_{\chi,н.}$ и 0 – $t_{\chi,к.}$ соответственно.

Если теплообмен осуществляется при изменении агрегатного состояния теплоносителя (конденсация пара, испарение жидкости) или в процессе теплообмена протекают химические реакции, сопровождаемые тепловыми эффектами, то в тепловом балансе должно быть учтено тепло, выделяющееся при физиче-

ском или химическом превращении. Так, при конденсации насыщенного пара величина $I_{г.н.}$ в уравнении (1.7) представляет собой энтальпию поступающего в аппарат пара, а $I_{г.к.}$ – энтальпию удаляемого парового конденсата.

В случае использования перегретого пара его энтальпия $I_{г.н.}$ складывается из тепла, отдаваемого паром при охлаждении от температуры $t_{г.н.}$ до температуры насыщения $t_{г.нас.}$, тепла конденсации пара и тепла, выделяющегося при охлаждении конденсата:

$$Q = G_r(I_{г.н.} - I_{г.к.}) = G_r c_{г.п.}(t_{г.н.} - t_{г.нас.}) + G_r r + G_r c_{г.к.}(t_{г.нас.} - t_{г.к.}), \quad (1.9)$$

где $c_{г.п.}$ и $c_{г.к.}$ – удельные теплоемкости пара и конденсата; $t_{г.к.}$ – температура конденсата на выходе. При обогреве насыщенным паром, если конденсат не охлаждается, т.е. $t_{г.к.} = t_{г.н.} = t_{г.нас.}$, первый и третий члены правой части уравнения (1.9) из теплового баланса исключаются.

Для неустановившегося режима, когда наблюдается изменение температуры теплоносителя dt в интервале времени $d\tau$, уравнения баланса для одного из теплоносителей, подаваемого в трубное пространство:

$$dQ = V \rho_x c_x dt_{x.к.} = G_r(I_{г.н.} - I_{г.к.})d\tau - G_x(I_{x.к.} - I_{x.н.})d\tau,$$

где V – объем трубного пространства (m^3), ρ_x – плотность нагреваемой среды (kg/m^3).

Преобразуем уравнение баланса и получим дифференциальное уравнение относительно температуры холодного теплоносителя на выходе аппарата:

$$V \rho_x c_x \frac{dt_{x.к.}}{d\tau} = G_r(I_{г.н.} - I_{г.к.}) - G_x(I_{x.к.} - I_{x.н.}). \quad (1.10)$$

В качестве примера составим уравнение баланса для нагреваемой жидкости в трубном пространстве за малый промежуток времени $d\tau$. В этом случае следует учесть:

– теплоту, поступившую в теплообменник с жидкостью,
 $dQ = G_x c_x t_{x.н.} d\tau$;

– теплоту, полученную жидкостью от горячего теплоносителя через теплопередающую поверхность металлической стенки труб и затраченную на увеличение температуры жидкости $t_{x.к.}$, $dQ = KF\Delta t_{cp} d\tau$;

– теплоту, уходящую с жидкостью из теплообменника,
 $dQ = G_x c_x t_{x.к.} d\tau$.

Тогда уравнение баланса имеет вид:

$$V\rho_x c_x \frac{dt_{x.к.}}{d\tau} = G_x c_x (t_{x.н.} - t_{x.к.}) + KF\Delta t_{cp}. \quad (1.11)$$

Расчет коэффициентов теплоотдачи

Выбор уравнения для расчета коэффициентов теплоотдачи, используемых в уравнениях баланса, зависит от характера теплообмена (без изменения агрегатного состояния, кипение или конденсация), вида поверхности теплообмена, типа конструкции, режима движения теплоносителя [3, 4].

1. При движении теплоносителя в прямых трубах круглого сечения или в каналах некруглого сечения без изменения агрегатного состояния коэффициент теплоотдачи определяют по следующим уравнениям:

1.1. При развитом турбулентном движении ($Re \geq 10^4$):

$$\alpha = \frac{\lambda}{\ell} Nu = 0.023 \frac{\lambda}{\ell} Re^{0.8} Pr^{0.4} \left(\frac{Pr}{Pr_{ст}} \right)^{0.25}, \quad (1.12)$$

$$Nu = \alpha \frac{\ell}{\lambda}, \quad Re = \frac{\omega \ell \rho}{\mu}, \quad Pr = \frac{c\mu}{\lambda},$$

где Nu – критерий Нуссельта; Pr – критерий Прандтля; $Pr_{ст}$ – критерий Прандтля, рассчитанный при температуре стенки; ω – скорость (м/с). Определяющим размером ℓ является эквива-

лентный диаметр (для труб круглого сечения – внутренний диаметр трубы $d_t^{\text{внутр.}}$ (м)); определяющей температурой, при которой рассчитывают физические свойства среды, – средняя температура теплоносителя. Физические свойства: λ – теплопроводность; ρ – плотность; μ – динамическая вязкость (Па·с).

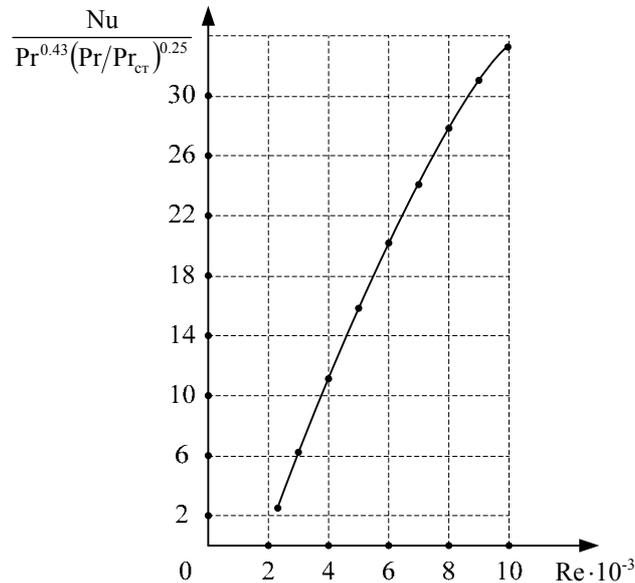


Рис. 1.2. К определению α при $2300 < Re < 10000$

1.2. При $2300 < Re < 10000$ приближенное значение коэффициента теплоотдачи $\alpha = Nu \frac{\lambda}{\ell}$ можно определить, используя график (рис. 1.2).

1.3. В ламинарном режиме ($Re \leq 2300$):

а) при значениях $Gr Pr = \frac{g \ell^3 \rho^2 \beta \Delta t}{\mu^2} Pr \leq 500000$ (Gr – критерий Грасгофа, g – ускорение свободного падения (m/s^2), β – коэффициент объемного расширения теплоносителя (1/град), Δt – разность температур между стенкой и теплоносителем):

$$\text{Re Pr} \frac{d}{L} > 12, \alpha = 1.61 \frac{\lambda}{\ell} \left(\text{Re Pr} \frac{d_{\text{внутр.}}}{L} \right)^{1/3} \left(\frac{\mu}{\mu_{\text{ст}}} \right)^{0.14}; \quad (1.13)$$

$$\text{Re Pr} \frac{d}{L} \leq 12, \alpha = 3.66 \frac{\lambda}{\ell} \left(\frac{\mu}{\mu_{\text{ст}}} \right)^{0.14}; \quad (1.14)$$

где $\mu_{\text{ст}}$ – вязкость теплоносителя при температуре стенки; L – длина трубы (м);

б) при значениях $\text{Gr Pr} > 500000$

$$\alpha = 0.15 \frac{\lambda}{\ell} (\text{Re Pr})^{0.33} (\text{Gr Pr})^{0.1} \left(\frac{\text{Pr}}{\text{Pr}_{\text{ст}}} \right)^{0.25}. \quad (1.15)$$

2. При движении теплоносителя в межтрубном пространстве с сегментными перегородками коэффициент теплоотдачи рассчитывают по уравнениям:

$$\text{Re} \geq 1000, \alpha = 0.24 \frac{\lambda}{\ell} \text{Re}^{0.6} \text{Pr}^{0.36} \left(\frac{\text{Pr}}{\text{Pr}_{\text{ст}}} \right)^{0.25}; \quad (1.16)$$

$$\text{Re} < 1000, \alpha = 0.34 \frac{\lambda}{\ell} \text{Re}^{0.5} \text{Pr}^{0.36} \left(\frac{\text{Pr}}{\text{Pr}_{\text{ст}}} \right)^{0.25}. \quad (1.17)$$

В уравнениях (1.16), (1.17) за определяющий геометрический размер принимают наружный диаметр теплообменных труб. Скорость потока определяют для площади сечения потока между перегородками [3].

3. При конденсации пара на наружной поверхности пучка из n вертикальных труб коэффициент теплоотдачи:

$$\alpha = 3.78 \lambda_3 \sqrt{\frac{\rho^2 d_{\text{внеш.}} n}{\mu G}}, \quad (1.18)$$

для n горизонтальных труб длиной L

$$\alpha = 2.02 \varepsilon \lambda_3 \sqrt{\frac{\rho^2 L n}{\mu G}}, \quad (1.19)$$

здесь $d_t^{\text{внеш.}}$ – внешний диаметр трубы, $\varepsilon = 0.7$ при $n \leq 100$ и $\varepsilon = 0.6$ при $n > 100$.

Управление динамическими режимами работы теплообменного аппарата

Режимные параметры теплообменного оборудования являются переменными величинами как во времени, так и в пространстве. Такие параметры как температуры теплоносителей в разных точках аппарата имеют различные значения. Основной причиной изменения параметров во времени является воздействие возмущений на аппарат в ходе его эксплуатации. В частности отклонения входных параметров (расход, температура одного из теплоносителей) от проектных значений представляют собой возмущения на входе процесса.

Наличие возмущений может привести к нарушению условий удовлетворительного функционирования аппарата, т.е. невыполнению требований по конечным температурам теплоносителей или их агрегатному состоянию. Для исключения таких ситуаций необходима система управления, реализованная на базе контрольно-измерительных приборов и ЭВМ.

Управляющим параметром теплообменного аппарата, предназначенного для нагрева, охлаждения или конденсации одного из теплоносителей, является расход второго теплоносителя.

Одним из способов определения значений управляющего параметра является расчет динамической модели процесса. Расчет модели проводится программным путем.

Динамическая модель процесса состоит из дифференциальных уравнений, характеризующих изменение во времени температуры движущихся в теплообменнике сред, температуры теплопередающей стенки и др. [5]. Для решения уравнений могут использоваться численные методы.

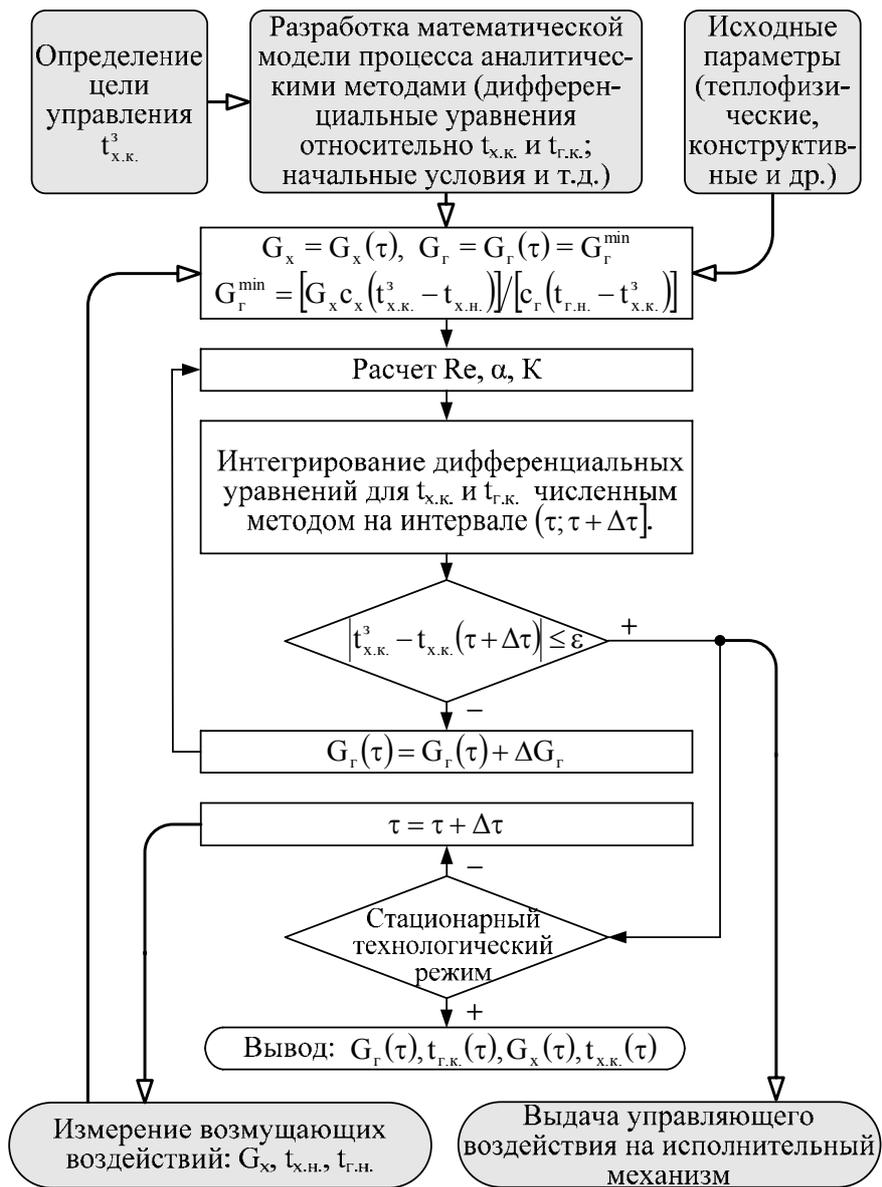


Рис. 1.3. Структура системы управления теплообменным аппаратом

Рассмотрим работу теплообменного аппарата, предназначенного для нагревания технологического потока. Модель такого аппарата представлена дифференциальными уравнениями относительно температур $t_{x,k}$ и $t_{г,k}$. Соответствующие уравнения составляются аналитическими методами на основе фундаментальных законов сохранения тепла и по виду аналогичны уравнению (1.11).

Пусть расход нагреваемой смеси на входе теплообменника заданной конструкции условно смоделирован в виде функцией времени $G_x = G_x(\tau)$. Требуется найти расход нагревающего агента $G_r(\tau)$, при котором температура нагреваемой смеси на выходе аппарата равна заданной $t_{x,k}^3$ в дискретные моменты времени $\tau = k\Delta\tau$ ($k = 1, 2, 3, \dots$).

Расчет требуемого управления осуществляется системой управления (рис. 1.3). На основе измеренного значения $G_x = G_x(\tau)$ и первого приближения расхода $G_r(\tau)$ в начальный момент времени рассчитываются коэффициенты теплоотдачи α с учетом режима течения движущихся сред по одной из формул (1.12) – (1.19). По формуле (1.6) рассчитывается коэффициент теплопередачи K . Далее интегрируются дифференциальные уравнения. В конце временного такта проверяется условие равенства температуры нагреваемой смеси на выходе аппарата заданному значению. Если условие выполняется, то переходят к расчету на следующем временном такте, иначе выбирается новое приближение $G_r(\tau)$ в текущем такте.

При решении задачи управления конденсатором заданной конструкции, как правило, требуется определить расход охлаждающего агента $G_x(\tau)$ с начальной температурой $t_{x,n}$, при котором полностью конденсируется паровая смесь. Возмущающими параметрами являются расход и температура паровой (газовой) смеси.

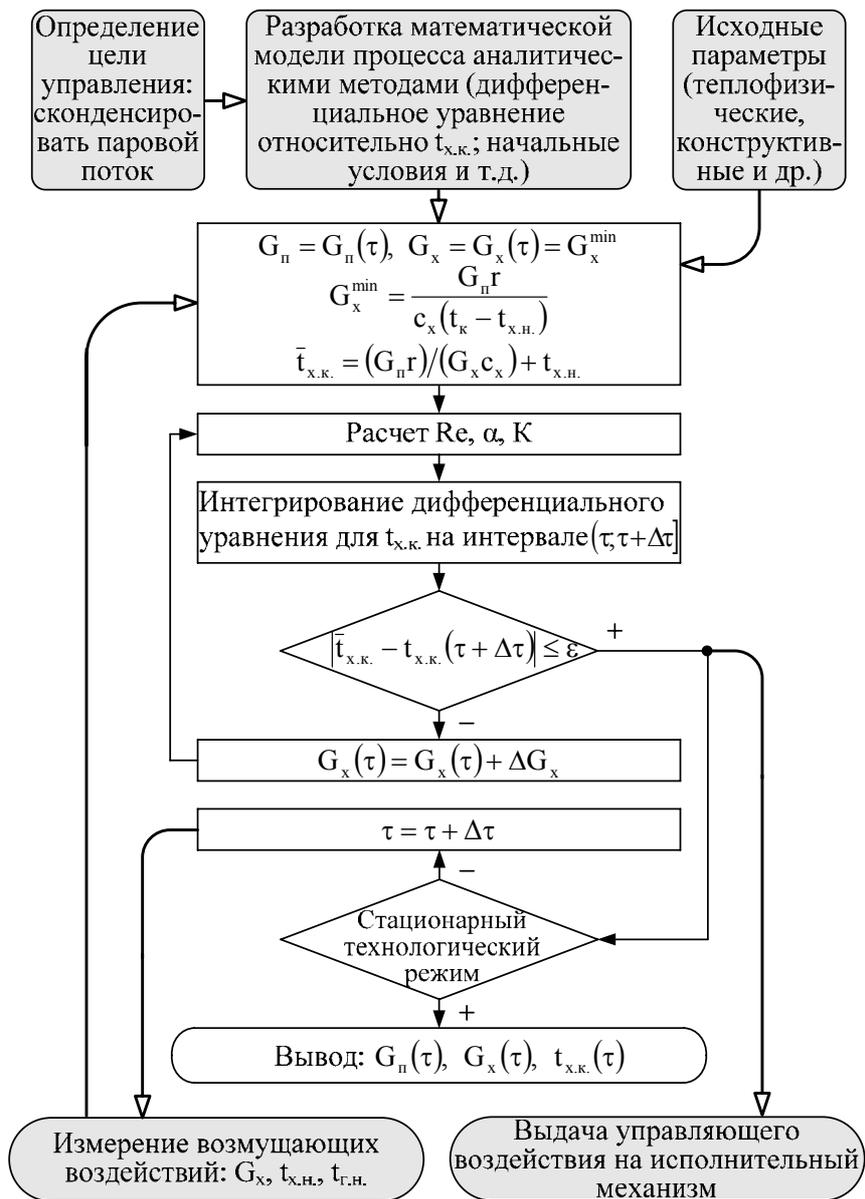


Рис. 1.4. Структура системы управления конденсатором

Рассмотрим алгоритм поиска $G_x(\tau)$ (рис. 1.4) в дискретные моменты времени $\tau = k\Delta\tau$ ($k = 1, 2, 3, \dots$). Расход паровой смеси на входе теплообменника условно смоделирован в виде функции времени $G_n = G_n(\tau)$. Известна температура t_k или давление конденсации паров. Т.к. температура одного из теплоносителей остается постоянной, то динамическую модель процесса представим уравнением относительно температуры охлаждающего агента на выходе аппарата $t_{x.k}$. По своей структуре уравнение аналогично выражению (1.11). Температура конденсата постоянна и равна t_k .

Условием окончания поиска на каждом такте является равенство температуры охлаждающего агента на выходе, рассчитанной из уравнений динамики, температуре, определяемой балансовым соотношением:

$$G_x c_x (\bar{t}_{x.k} - t_{x.n.}) = G_n r, \text{ отсюда } \bar{t}_{x.k} = \frac{G_n r}{G_x c_x} + t_{x.n.}.$$

Начальные условия интегрирования дифференциальных уравнений задаются исходя из предположения о том, что аппарат до момента возникновения возмущений функционировал удовлетворительно. В этом случае:

$$t_{x.k}^{(0)} \approx t_{x.k}^3, \quad t_{г.к.}^{(0)} \approx t_{x.k}^{(0)} + 5 \text{ (для теплообменника);}$$

$$t_{x.k}^{(0)} \approx t_k - 5 \text{ (для конденсатора).}$$

Процедура поиска управления продолжается до достижения теплообменным аппаратом стационарного (установившегося) режима работы, при котором состояние входа и выхода аппарата неизменны во времени.

Построение функциональной схемы автоматизации

Моделируемая система управления теплообменным процессом должна выполнять следующие функции:

– измерение параметров процесса (возмущений и отклоне-

ний: температура, расход теплоносителей, уровень жидкости в аппарате и др.);

- расчет управляющих параметров на основе математической модели;

- выдача управляющего воздействия на исполнительный механизм (изменение расхода одного из теплоносителей).

Графически работу системы управления представляют в виде функциональной схемы автоматизации процесса [6, 7]. Функциональная схема автоматизации содержит структуру и функциональные связи между технологическим процессом и средствами контроля и управления. На схеме (рис. 1.5) показывают с помощью условных обозначений:

- основное технологическое оборудование (теплообменный аппарат, насосное оборудование и т.д.);

- потоки жидкостей, газов и пара на входе и выходе теплообменника;

- приборы и средства автоматизации (6, 7, приложение I).

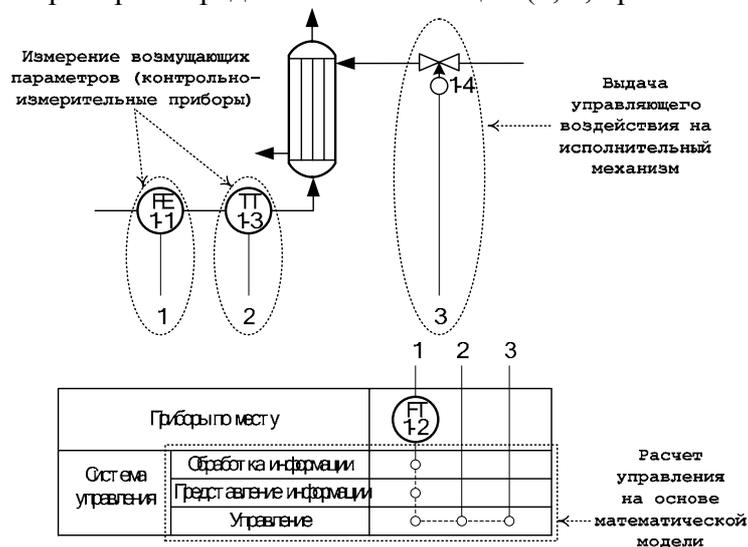


Рис. 1.5. Функциональная схема автоматизации теплообменного процесса

Варианты заданий 1а – 1г

Тема курсовой работы: моделирование системы управления теплообменным аппаратом на основе анализа уравнений динамики процесса.

Задание:

– исследовать процесс функционирования кожухотрубного теплообменника, предназначенного для теплообмена между двумя водно-органическими растворами (оба раствора – коррозионно-активные жидкости с физико-химическими свойствами, близкими к свойствам воды);

– составить динамическую модель процесса;

– определить расход горячего раствора (подается в трубное пространство) в дискретные моменты времени, обеспечивающий температуру нагреваемой среды на выходе аппарата 45 °С;

– зависимость расхода горячего теплоносителя, расхода нагреваемой смеси, а также температур теплоносителей на выходе аппарата от времени представить в табличном и графическом виде;

– построить функциональную схему автоматизации;

– разработать презентацию курсовой работы и подготовить доклад к защите.

Исходные данные и допущения:

- 1) длительность процесса определяется временем выхода на установившийся режим;
- 2) расход нагреваемой среды на входе теплообменника задан в виде функции времени $G_x(\tau)$;
- 3) начальные температуры нагреваемой смеси $t_{x.n.}$ и нагревающего агента (горячего теплоносителя) $t_{г.н.}$;
- 4) теплофизические свойства горячего теплоносителя: плотность ρ_r , теплопроводность λ_r , динамическая вязкость μ_r , удельная теплоемкость c_r ;

5) теплофизические свойства нагреваемой смеси: плотность ρ_x , теплопроводность λ_x , динамическая вязкость μ_x , удельная теплоемкость c_x ;

6) параметры теплообменника: диаметр кожуха D , диаметр труб d_t , число ходов z , число труб n , длина труб L , поверхность теплообмена F , площадь сечения потока между перегородками s_n , площадь сечения одного хода по трубам s_t (табл. 1.1);

7) для определения режима течения жидкости в трубном пространстве используется выражение:

$$Re_r = \frac{4G_r}{\pi d_t^{\text{внутр.}} (n/z) \mu_r};$$

8) для определения режима течения жидкости в межтрубном пространстве используется выражение:

$$Re_x = \frac{G_x d_t^{\text{внеш.}}}{s_n \mu_x}.$$

Таблица 1.1

Параметр	Вариант 1а	Вариант 1б
$G_x(\tau)$, кг/с	$\begin{cases} e^{\tau/1300} + 20, & \tau \leq 4500; \\ 50, & \tau > 4500 \end{cases}$	$\begin{cases} \tau^{0.3} + 20, & \tau \leq 4500; \\ 33, & \tau > 4500 \end{cases}$
$t_{x.n.}$, °C	23	18
$t_{r.n.}$, °C	115	105
ρ_r , кг/м ³	986	986
λ_r , Вт/(м·град)	0.662	0.662
μ_r , Па·с	0.00054	0.00054
c_r , Дж/(кг·град)	4190	4190
ρ_x , кг/м ³	996	996
λ_x , Вт/(м·град)	0.618	0.618
μ_x , Па·с	0.000804	0.000804
c_x , Дж/(кг·град)	4180	4180
D , мм	600	800
d_t , мм	20×2	25×2

z	6	6
n	316	384
L, м	4	4
F, м ²	79	121
s _п , м ²	0.048	0.07
s _т , м ²	0.009	0.022
Параметр	Вариант 1в	Вариант 1г
G _x (τ), кг/с	$\begin{cases} \tau^{0.25} + e^{\tau/2500} + 20, & \tau \leq 4500; \\ 35, & \tau > 4500 \end{cases}$	$\begin{cases} e^{\tau/2500} \sin(\tau/2) + 30, & \tau \leq 5800; \\ 40, & \tau > 5800 \end{cases}$
t _{х.н.} , °С	20	20
t _{г.н.} , °С	112	110
ρ _г , кг/м ³	986	986
λ _г , Вт/(м·град)	0.662	0.662
μ _г , Па·с	0.00054	0.00054
c _г , Дж/(кг·град)	4190	4190
ρ _х , кг/м ³	996	996
λ _х , Вт/(м·град)	0.618	0.618
μ _х , Па·с	0.000804	0.000804
c _х , Дж/(кг·град)	4180	4180
D, мм	800	600
d _т , мм	20×2	25×2
z	6	4
n	618	206
L, м	3	6
F, м ²	116	97
s _п , м ²	0.07	0.045
s _т , м ²	0.02	0.018

Варианты заданий 1д – 1з

Тема курсовой работы: моделирование системы управления конденсатором на основе анализа уравнений динамики процесса.

Задание:

– исследовать процесс функционирования кожухотрубного

конденсатора, предназначенного для конденсации паров органической жидкости и паров воды;

- составить динамическую модель процесса;
- определить расход охлаждающего агента (воды) в дискретные моменты времени, обеспечивающий полную конденсацию паров;
- зависимость значения расхода охлаждающего агента, расхода паров, а также температуры охлаждающего агента на выходе аппарата от времени представить в табличном и графическом виде;
- построить функциональную схему автоматизации;
- разработать презентацию курсовой работы и подготовить доклад к защите.

Исходные данные и допущения:

- 1) длительность процесса определяется временем выхода на установившийся режим;
- 2) расход паров органической жидкости и паров воды на входе теплообменника (подаются в межтрубное пространство) задан в виде функции времени $G_n(\tau)$;
- 3) удельная теплота конденсации смеси r ;
- 4) температура конденсации в дефлегматоре t_k ; начальная температура охлаждающего агента $t_{х.н.}$;
- 5) теплофизические свойства охлаждающего агента: плотность ρ_x , теплопроводность λ_x , динамическая вязкость μ_x , удельная теплоемкость c_x ;
- 6) теплофизические свойства конденсата при температуре конденсации: плотность ρ_k , теплопроводность λ_k , динамическая вязкость μ_k ;
- 7) параметры теплообменника (вертикального): диаметр кожуха D , диаметр трубок d_t , число ходов z , число труб n , длина труб L , поверхность теплообмена F (табл. 1.2).

Таблица 1.2

Параметр	Вариант 1д	Вариант 1е
$G_n(\tau)$, кг/с	$\begin{cases} e^{\tau/4910} - 0.5, & \tau \leq 3600; \\ 1.6, & \tau > 3600 \end{cases}$	$\begin{cases} \tau^{0.11} + 0.5, & \tau \leq 3600; \\ 3, & \tau > 3600 \end{cases}$
γ , Дж/кг	1180000	1095000
t_k , °C	66	61
$t_{x.n.}$, °C	20	22
ρ_x , кг/м ³	996	996
λ_x , Вт/(м·град)	0.616	0.616
μ_x , Па·с	0.00082	0.00082
c_x , Дж/(кг·град)	4180	4180
ρ_k , кг/м ³	760	770
λ_k , Вт/(м·град)	0.219	0.218
μ_k , Па·с	0.000446	0.000447
D , мм	600	600
$d_{т_2}$, мм	25×2	25×2
z	2	4
n	240	206
L , м	3	3
F , м ²	57	49
Параметр	Вариант 1ж	Вариант 1з
$G_n(\tau)$, кг/с	$\begin{cases} \tau^{0.05} + e^{\tau/8500} - 0.4, & \tau \leq 3600; \\ 2.7, & \tau > 3600 \end{cases}$	$\begin{cases} e^{\tau/7500} + \cos(\tau/3.4) - 0.15, & \tau \leq 4300; \\ 1.5, & \tau > 4300 \end{cases}$
γ , Дж/кг	1150000	1210000
t_k , °C	64	68
$t_{x.n.}$, °C	23	19
ρ_x , кг/м ³	996	996
λ_x , Вт/(м·град)	0.616	0.616
μ_x , Па·с	0.00082	0.00082
c_x , Дж/(кг·град)	4180	4180
ρ_k , кг/м ³	765	780
λ_k , Вт/(м·град)	0.218	0.217
μ_k , Па·с	0.000447	0.000450
D , мм	600	600
$d_{т_2}$, мм	25×2	25×2
z	6	1
n	196	257
L , м	3	2
F , м ²	46	40

II. МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗАЦИИ ПРОЦЕССОМ АБСОРБЦИИ

План выполнения работы

1. *Изучение процесса абсорбции:*
 - основные определения и закономерности;
 - математическая модель;
 - алгоритм расчета.
2. *Постановка задачи моделирования в соответствии с заданием на курсовую работу.*
3. *Разработка моделирующей программы:*
 - алгоритм процедуры расчета установки при изменении расхода абсорбента в области $[L_n^{\min}, L_n^{\max}]$;
 - алгоритм процедуры расчета установки при изменении температуры абсорбента в области $[t_{ж.н.}^{\min}, t_{ж.н.}^{\max}]$;
 - алгоритм процедуры определения оптимального технологического режима установки;
 - код моделирующей программы.
4. *Анализ и представление результатов моделирования.*
5. *Анализ процесса абсорбции с точки зрения задач управления.*
6. *Построение функциональной схемы автоматизации объекта.*
7. *Разработка презентации курсовой работы (не более 8 слайдов, в т.ч. постановка задачи, математическая модель процесса, алгоритмы расчета, результаты моделирования и др.).*
8. *Подготовка доклада к защите (длительность доклада не более 3-4 мин.).*

Рекомендуемая литература: [1– 9].

Краткое описание процесса

Абсорбцией называется процесс поглощения газов или паров из газовых или паро-газовых смесей жидкими поглотителями (абсорбентами). При физической абсорбции поглощаемый газ (абсорбтив) не взаимодействует химически с абсорбентом. Если же абсорбтив образует с абсорбентом химическое соединение, то процесс называется *хемосорбцией* [1, 8].

В промышленности процессы абсорбции применяются главным образом для извлечения ценных компонентов из газовых смесей или для очистки этих смесей от вредных веществ.

Применяемые для абсорбционных процессов массообменные аппараты принято подразделять на две группы: с непрерывным (насадочные колонны) и со ступенчатым контактом фаз (тарельчатые колонны). Принципиальная схема противоточного аппарата со ступенчатым контактом фаз приведена на рис. 2.1.

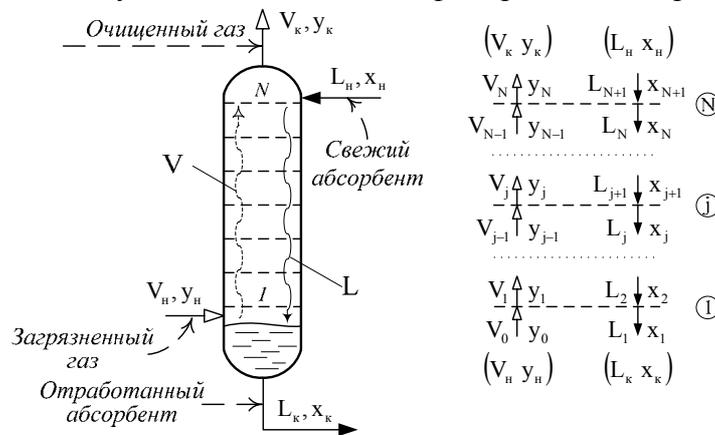


Рис. 2.1. Принципиальная технологическая схема тарельчатого абсорбера

При рассмотрении процесса абсорбции ограничимся простым случаем, когда в массопереносе участвует лишь один из компонентов. Тогда каждую из взаимодействующих фаз можно считать бинарным раствором, состоящим из распределяемого

компонента (участвующее в массопереносе вещество) и инертного компонента (остальные компоненты данной фазы). Для характеристики состава раствора достаточно указать концентрацию распределяемого компонента.

В качестве исходных данных при расчете абсорбционных процессов обычно задаются начальные составы разделяемой смеси и разделяющего агента (абсорбента), расход исходной газовой смеси, а также конечная концентрация в ней извлекаемого компонента. Результаты расчета: расход абсорбента, параметры конструкции и технологического режима аппарата.

Математическое описание процесса абсорбции

Материальный баланс [3] непрерывного процесса абсорбции в установившихся условиях может быть представлен следующей системой уравнений:

$$\begin{aligned} V_n y_n + L_n x_n - V_k y_k - L_k x_k &= 0, \\ V_n (1 - y_n) - V_k (1 - y_k) &= 0, \\ L_n (1 - x_n) - L_k (1 - x_k) &= 0, \\ L_n + V_n - L_k - V_k &= 0, \end{aligned} \quad (2.1)$$

L_n, V_n – расходы абсорбента и газовой смеси на входе аппарата; L_k, V_k – расходы абсорбента и газовой смеси на выходе аппарата; x_n, y_n – начальная концентрация распределяемого компонента в жидкой и газовой фазах; x_k, y_k – конечная концентрация распределяемого компонента в жидкой и газовой фазах (рис. 2.1). В уравнениях (2.1) расходы фаз должны быть массовыми, если концентрации выражены в масс. долях; при выражении составов в мол. долях расходы должны быть мольными.

Полный массовый или мольный поток распределяемого компонента из одной фазы в другую во всем аппарате может быть найден из уравнений:

$$M = V_n y_n - V_k y_k = L_k x_k - L_n x_n$$

или

$$M = V_n - V_k = L_k - L_n. \quad (2.2)$$

Работу массообменного аппарата часто характеризуют степенью извлечения распределяемого компонента. Для абсорбции степень извлечения s равна:

$$s = \frac{M}{V_n y_n}. \quad (2.3)$$

Кроме уравнений (2.1), характеризующих работу всего аппарата, должны соблюдаться уравнения внутреннего материального баланса, описывающие работу отдельных ступеней аппарата. Для противоточных аппаратов со ступенчатым контактом фаз эти уравнения связывают концентрацию распределяемого компонента в фазе, выходящей из какой-либо ступени (y_j), с его концентрацией в другой фазе, поступающей на ту же ступень (x_{j+1}):

$$y_j = \frac{L_{j+1}}{V_j} x_{j+1} + \frac{V_n}{V_j} y_n - \frac{L_k}{V_j} x_k$$

или

$$y_j = \frac{L_{j+1}}{V_j} x_{j+1} + \frac{V_k}{V_j} y_k - \frac{L_n}{V_j} x_n, \quad j=1,2,\dots,N. \quad (2.4)$$

Уравнения (2.4) справедливы в отсутствие взаимного уноса фаз (структура потоков внутри ступеней может быть произвольной). Если расходы существенно меняются внутри аппарата, т.е. если L_{j+1} , V_j заметно зависят от номера ступени, то уравнения (2.4) нелинейны и должны быть дополнены уравнениями:

$$\begin{aligned} L_{j+1}(1-x_{j+1}) &= L_n(1-x_n) = L_k(1-x_k), \\ V_j(1-y_j) &= V_n(1-y_n) = V_k(1-y_k), \\ V_j - L_{j+1} &= V_k - L_n = V_n - L_k, \quad j=1,2,\dots,N-1. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Концентрация распределяемого компонента в газовой фазе может быть рассчитана с помощью равновесной концентрации и эффективности контактной ступени:

$$y_i = y_{j-1} + \eta(y^*(x_j, t_j) - y_{j-1}), \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (2.6)$$

где η – эффективность или к.п.д. тарелки, $y^*(x_j, t_j)$ – концентрация распределяемого компонента в газовой фазе, равновесной с жидкостью, определяемая уравнением равновесия на основе закона Генри:

$$y^*(x_j, t_j) = m_j x_j, \quad m_j = E_j / P_j \quad (2.7)$$

здесь m_j – коэффициент распределения, E_j – константа Генри, которая зависит от температуры и свойств газа, P_j – давление на тарелке.

Для определения температуры фаз (которая должна быть одинаковой) систему уравнений материального баланса (2.1) – (2.5) необходимо дополнить уравнениями *теплового баланса* [3] для всего аппарата и для каждой ступени:

$$V_n I_n + L_n i_n - V_k I_k - L_k i_k = 0; \quad (2.8)$$

$$V_{j-1} I_{j-1} + L_{j+1} i_{j+1} - V_j I_j - L_j i_j = 0, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (2.9)$$

где I_n, I_k, i_n, i_k – начальные и конечные удельные энтальпии (теплосодержание) соответствующих фаз; $I_j, I_{j-1}, i_j, i_{j+1}$ – энтальпии фаз на выходе и входе ступени (кДж/кг).

При расчете неизотермических процессов кроме параметров, характеризующих входные потоки, в качестве исходных данных обычно задаются числом ступеней разделения. Повторение расчетов при различном соотношении расходов фаз и числе ступеней позволяет найти условия, при которых могут быть получены определенные конечные составы. Возможная схема расчета для неизотермической абсорбции, проводимой в тарельчатом аппарате, показана на рис. 2.2.

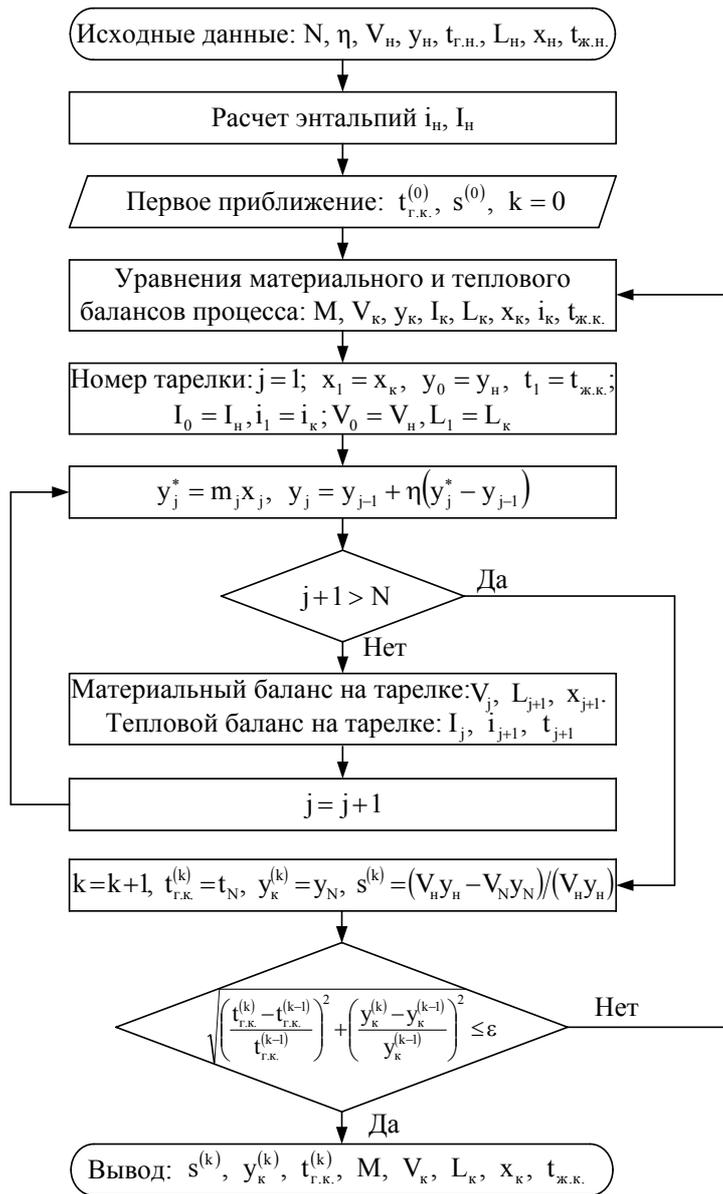


Рис. 2.2. Алгоритм расчета абсорбера со ступенчатым контактом фаз

В соответствии с этой схемой сначала задаются числом тарелок, к. п. д. тарелки, составом и температурой газа на выходе из абсорбера. Затем из материального и теплового балансов для всего процесса определяют конечные расходы фаз, температуру и состав выходящей из абсорбера жидкости. После этого, используя уравнения балансов и равновесия, проводят последовательный расчет расходов, составов и температур для всех ступеней. Полученные значения температуры и концентрации в газе на последней ступени сопоставляют с y_k и $t_{г.к.}$, которыми задавались в начале расчета. При значительном расхождении расчет повторяют, при этом за новые значения конечной концентрации и температуры газа принимают значения, полученные в предыдущей итерации.

Мольные энтальпии жидкости и газа (кДж/кмоль) рассчитываются по следующим формулам:

$$i = (c_m^p x + c_m^a (1 - x))t, \quad (2.10)$$

$$I = (c_m^p y + c_m^u (1 - y))t + r_m^p y, \quad (2.11)$$

где c_m^p , c_m^a , c_m^u – мольные теплоемкости распределяемого компонента, абсорбента и инертного компонента (кДж/(кмоль·град)); r_m^p – мольная теплота испарения распределяемого компонента (кДж/кмоль); x , y – концентрации распределяемого компонента в жидкости и газе (мол. доли). Мольная теплоемкость связана с массовой теплоемкостью c (кДж/(кг·град)) и молекулярной массой M_k (кг/кмоль):

$$c_m = cM_k.$$

Температура газа, выходящего из абсорбера $t_{г.к.}^{(0)}$, задаваемая в качестве первого приближения, принимается большей начальной температуры абсорбента на $1 \div 3$ °С. Первое приближение степени извлечения распределяемого компонента $s^{(0)}$ выбирается из диапазона $85 \div 98$ %. На основе первого приближения рассчитываются параметры потоков на выходе аппарата:

$$M = sV_H y_H ;$$

$$V_K = V_H - M, L_K = L_H + M ;$$

$$x_K = \frac{L_K - L_H(1 - x_H)}{L_K}, y_K = \frac{V_K - V_H(1 - y_H)}{V_K}.$$

Энтальпия пара на выходе аппарата I_K определяется на основе выражения (2.11), энтальпия жидкости – с помощью уравнения (2.8):

$$i_K = \frac{V_H I_H + L_H i_H - V_K I_K}{L_K}.$$

Температура жидкости:

$$t_{ж.к.} = \frac{i_K}{c_m^p x_K + c_m^a (1 - x_K)}.$$

Определив величины y_K и $t_{ж.к.}$, необходимо провести тарелочный расчет с целью уточнения степени извлечения s . При этом для первой тарелки известны следующие величины:

$$x_1 = x_K, y_0 = y_H, t_1 = t_{ж.к.};$$

$$I_0 = I_H, V_0 = V_H;$$

$$i_1 = i_K, L_1 = L_K.$$

Уравнение равновесия (2.7) позволяет рассчитать равновесную концентрацию в газовой смеси на первой тарелке $y^*(x_1, t_1)$. Величина y_1 рассчитывается с помощью выражения (2.6). Расход газа, уходящий с первой тарелки, а также расход и состав жидкости, поступающей на первую тарелку со второй, находим с помощью уравнений (2.5):

$$V_1 = V_H \frac{1 - y_H}{1 - y_1},$$

$$L_2 = V_1 - V_H + L_K,$$

$$x_2 = 1 - L_H \frac{1 - x_H}{L_2}.$$

Из теплового баланса для первой ступени можно определить температуру поступающей на нее жидкости:

$$I_1 = (c_m^p y_1 + c_m^a (1 - y_1)) t_1 + r_m^p y_1,$$

$$i_2 = \frac{V_1 I_1 + L_1 i_1 - V_0 I_0}{L_2},$$

$$t_2 = \frac{i_2}{c_m^p x_2 + c_m^a (1 - x_2)}.$$

Определяется концентрация распределяемого компонента в газовой фазе на второй тарелке y_2 и т.д. до нахождения t_N и y_N . После этого расчетные значения сравниваются с $t_{г.к.}$ и $y_{к.}$. Если они равны с заданной точностью, то расчет прекращают, иначе процедуру потарелочного расчета повторяют, при этом приняв в качестве следующего приближения $t_{г.к.}^{(k)}$ и $s^{(k)}$ данные из предыдущей итерации.

Регулирование состава очищенного газа на выходе абсорбционной установки

Отклонения качественных характеристик очищенного газа от требуемых значений возможны в результате наличия возмущений на входе установки (состав, расход, теплофизические свойства исходной газовой смеси и абсорбента), а также отклонений (температура и давление в аппарате). В этой связи целесообразно применение системы регулирования степени извлечения изменением расхода абсорбента и его температуры.

Для поддержания температуры абсорбента его подают в холодильный аппарат, в котором он охлаждается в результате переноса тепла через поверхность стенок холодному теплоносителю (хладагенту). Необходимое количество хладагента G определяется путем расчета тепловой нагрузки на холодильник:

$$G = \frac{Q}{c^x (t_{x.к.} - t_{x.н.})} = \frac{L_n c^a (t_{ж.} - t_{ж.н.})}{c^x (t_{x.к.} - t_{x.н.})}$$

где Q – тепловая нагрузка на холодильник (кВт); c^a , c^x – массовые теплоемкости абсорбента и хладагента при средней температуре (кДж/(кг·К)); $t_{ж}$, $t_{ж.н.}$ – начальная температура (на входе холодильника) и конечная температура (на входе абсорбера) абсорбента; $t_{х.к.}$, $t_{х.н.}$ – конечная и начальная температуры хладагента.

Использование аналитических зависимостей для определения управляющих параметров (расход хладагента) может быть реализовано в системе управления, принципиальная структура которой приведена на рис. 2.3.



Рис. 2.3. Структура системы управления абсорбционной установкой

Построение функциональной схемы автоматизации

Моделируемая система управления абсорбционным процессом, реализованная на базе контрольно-измерительных приборов и ЭВМ, должна выполнять следующие функции:

- измерение параметров процесса (возмущений: температура и расход загрязненной газовой смеси; отклонений: расход свежего абсорбента, температура и давление в аппарате, уровень жидкости в кубе и др.);
- расчет управляющих параметров на основе математической модели;
- выдача управляющего воздействия на исполнительный

механизм (изменение расходов свежего и обработанного абсорбента и т.д.).

Для графического представления структуры и функциональных связей между технологическим процессом и средствами контроля и управления используется функциональная схема автоматизации процесса [6, 7]. На схеме показывают с помощью условных обозначений (рис. 2.4):

- основное технологическое оборудование (абсорбер; теплообменное оборудование, необходимое для охлаждения абсорбента; насосное оборудование и т.д.);
- потоки жидкостей, газов и пара на входе и выходе абсорбера;
- приборы и средства автоматизации (6, 7, приложение I).

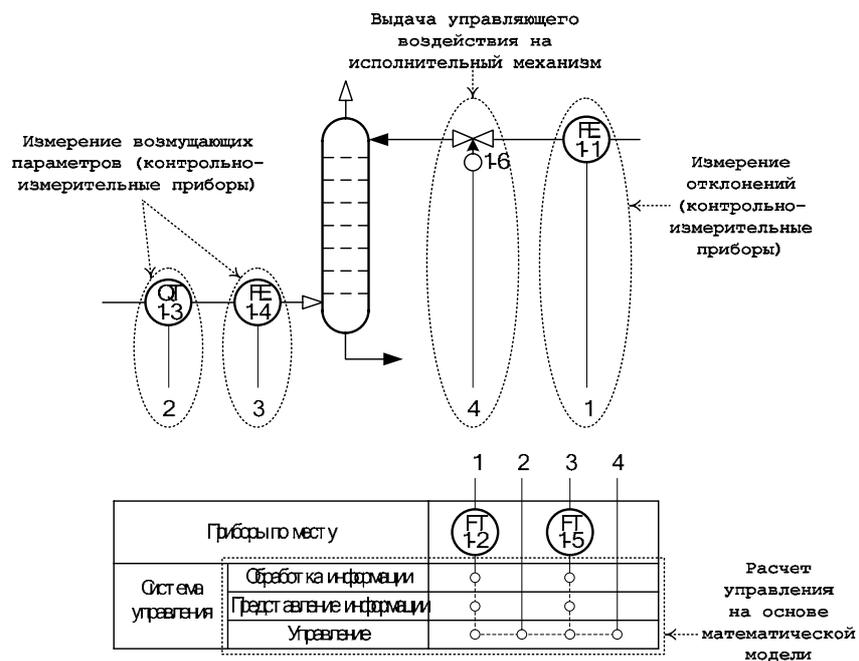


Рис. 2.4. Функциональная схема автоматизации процесса абсорбции

Варианты заданий 2а – 2д

Тема курсовой работы: моделирование системы управления процессом абсорбции на основе анализа статических режимов работы установки.

Задание:

– для процесса абсорбции паров н-гексана из смеси с метаном парафинистым поглотительным маслом, определить зависимость степени извлечения гексана от значений управляющих параметров процесса (расход абсорбента, расход хладагента в теплообменник для охлаждения абсорбента);

– определить оптимальный технологический режим работы установки, обеспечивающий максимальную степень извлечения гексана, построить профили концентрации и температуры по высоте абсорбционной колонны;

– зависимость степени извлечения от значений управляющих параметров представить в табличном и графическом виде;

– построить функциональную схему регулирования степени извлечения упрощенным и развернутым методами;

– разработать презентацию курсовой работы и подготовить доклад к защите.

Исходные данные и допущения:

1) параметры исходной газовой смеси (гексан – метан): концентрация гексана y_n , расход V_n , температура $t_{г.н.}$, теплота испарения гексана r_m^p , молярная теплоемкость газообразного метана c_m^i , молярная теплоемкость жидкого гексана c_m^p ;

2) параметры абсорбента (поглотительное масло): концентрация гексана x_n , расход $L_n^{mn} \div L_n^{max}$, начальная температура $t_{ж.}$, требуемая температура на входе абсорбера $t_{ж.н.}^{min} \div t_{ж.н.}^{max}$, молярная теплоемкость c_m^a , молярная масса M_k^a ;

3) пренебречь зависимостью теплоемкости и теплоты испаре-

ния компонентов от температуры (в расчетах использовать значения этих параметров при температуре 30 °С);

4) количество тарелок в абсорбере N;

5) к.п.д. тарелки η (табл. 2.1);

6) зависимость концентрации распределяемого компонента в газовой фазе, равновесной с жидкостью, от температуры жидкости t_j (°С) и концентрации x_j на j-ой ступени:

$$y^*(x_j, t_j) = 9930x_j \exp\left(-\frac{2697.55}{224.37 + t_j}\right), \quad j=1,2,\dots,N.$$

Таблица 2.1

Параметр	Вариант 2а	Вариант 2б	Вариант 2в	Вариант 2г	Вариант 2д
y_n , % мол.	18	22	23	25	30
V_n , кмоль/с	0.1	0.13	0.12	0.13	0.13
$t_{г.н.}$, °С	25	25	23	23	23
x_n , % мол.	1	1	1	1	1
L_n^{\min} , кмоль/с	0.09	0.08	0.09	0.10	0.11
L_n^{\max} , кмоль/с	0.20	0.25	0.30	0.50	0.90
$t_{ж.}$, °С	40	40	50	40	50
$t_{ж.н.}^{\min}$, °С	20	20	18	18	18
$t_{ж.н.}^{\max}$, °С	30	30	30	32	35
N	10	13	15	16	20
η	0.35	0.32	0.32	0.31	0.35
c_m^a , кДж/(кмоль·К)	300	300	300	300	300
c_m^u , кДж/(кмоль·К)	35.9	35.9	35.9	35.9	35.9
c_m^p , кДж/(кмоль·К)	196	196	196	196	196
r_m^p , кДж/кмоль	31200	31200	31200	31200	31200
M_k^a , кг/кмоль	200	200	200	200	200

III. МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗАЦИИ ПРОЦЕССОМ РЕКТИФИКАЦИИ

План выполнения работы

1. *Изучение процесса ректификации:*
 - основные определения и закономерности;
 - математическая модель;
 - алгоритм расчета статической модели.
2. *Постановка задачи моделирования в соответствии с заданием на курсовую работу.*
3. *Разработка моделирующей программы:*
 - алгоритм процедуры расчета установки в области изменения состава $[x_F^{\min}, x_F^{\max}]$ и расхода $[F^{\min}, F^{\max}]$ исходной смеси;
 - код моделирующей программы.
4. *Анализ и представление результатов моделирования.*
5. *Анализ процесса ректификации с точки зрения задач управления.*
6. *Построение функциональной схемы автоматизации объекта.*
7. *Разработка презентации курсовой работы (не более 8 слайдов, в т.ч. постановка задачи, математическая модель процесса, алгоритмы расчета, результаты моделирования и др.).*
8. *Подготовка доклада к защите (длительность доклада не более 3-4 мин.).*

Рекомендуемая литература: [1, 5 – 8, 10, 11].

Краткое описание процесса

Ректификация – процесс разделения жидких и парожидкостных смесей путем многократного частичного испарения жидкости и конденсации паров. Процесс осуществляется путем контакта потоков пара и жидкости, имеющих различную температуру, и проводится обычно в колонных аппаратах (рис. 3.1).

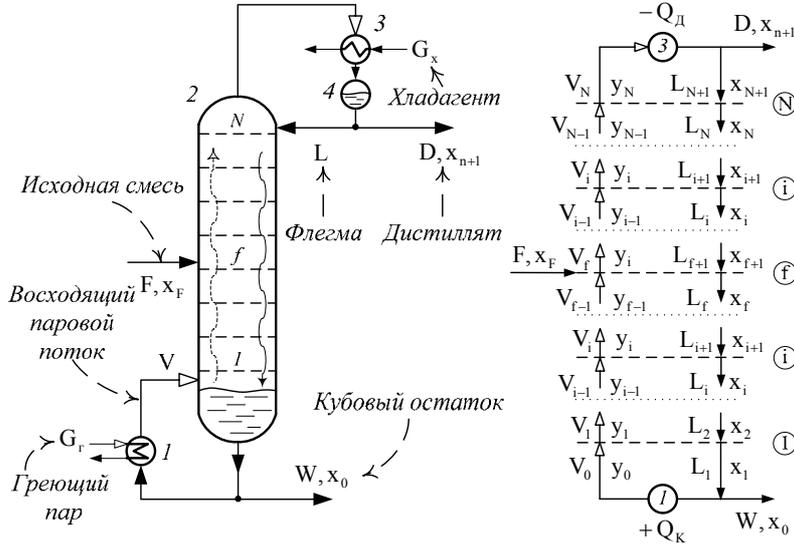


Рис. 3.1. Принципиальная технологическая схема ректификационной установки: 1 – кипятыльник, 2 – ректификационная колонна, 3 – дефлегматор, 4 – флегмовая емкость

При каждом контакте из жидкости испаряется преимущественно *легколетучий*, или *низкокипящий*, компонент (НК), которым обогащаются пары, а из паров конденсируется преимущественно *труднолетучий*, или *высококипящий*, компонент (ВК), переходящий в жидкость. Такой двусторонний обмен компонентами, повторяемый многократно, позволяет получить в конечном счете пары, представляющие собой почти чистый НК. Эти пары после конденсации в отдельном аппарате дают *дистиллят (ректификат)* и *флегму* – жидкость, возвращаемую для

орошения колонны и взаимодействия с поднимающимися парами. Пары получают путем частичного испарения снизу колонны остатка, являющего почти чистым ВК [1, 8].

Процесс ректификации широко применяется в различных областях химической, нефтехимической и пищевой промышленности для выделения компонентов в чистом виде.

Процесс ректификации может осуществляться в аппаратах с непрерывным контактом фаз (насадочных колоннах) либо в аппаратах со ступенчатым контактом фаз (тарельчатые колонны).

При рассмотрении непрерывной ректификации будем пренебрегать разделяющим действием кипятильника и дефлегматора, т.е. кипятильник и дефлегматор будем считать аппаратами соответственно полного испарения и полной конденсации. Расчет ректификационной установки заданной конструкции при известных характеристиках исходного сырья проводится с целью определения расходов флегмы и дистиллята, а также тепловой нагрузки на теплообменное оборудование.

Математическое описание процесса ректификации

Процесс массообмена протекает на каждой тарелке вследствие разности рабочих и равновесных концентраций НК в паре и в жидкости. По мере движения к кубу колонны жидкость обедняется (исчерпывается), а пар при движении вверх обогащается (укрепляется) НК. При построении математической модели примем следующие допущения:

– исходная бинарная смесь и флегма подаются в колонну в виде жидкости при температуре кипения;

– расход пара по высоте колонны постоянный:

$$V_i = V, \quad i = 0, 1, \dots, N;$$

– расход жидкости по высоте укрепляющей секции колонны постоянный:

$$L_i = L, \quad (i = f + 1, f + 2, \dots, N);$$

– расход жидкости по высоте исчерпывающей секции колонны постоянный:

$$L_i = F + L, \quad (i = 1, 2, \dots, f);$$

– в паровой фазе в зоне массообмена принимается полное вытеснение, а в жидкой фазе – полное перемешивание.

При принятых допущениях уравнения материального баланса для исчерпывающей части колонны, расположенной, ниже тарелки питания ($1 < i < f$) имеют вид:

$$(L + F)x_1 - Vy_0 - Wx_0 = 0 \quad (\text{куб колонны}); \quad (3.1)$$

$$(L + F)(x_{i+1} - x_i) + V(y_{i-1} - y_i) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, f - 1. \quad (3.2)$$

Для тарелки питания:

$$Fx_f + Lx_{f+1} - (L + F)x_f + V(y_{f-1} - y_f) = 0, \quad i = f. \quad (3.3)$$

Для укрепляющей части ($f < i \leq N$):

$$L(x_{i+1} - x_i) + V(y_{i-1} - y_i) = 0, \quad i = f + 1, f + 2, \dots, N; \quad (3.4)$$

$$Vy_N - (L + D)x_{N+1} = 0 \quad (\text{дефлегматор}). \quad (3.5)$$

В выражениях (3.1) – (3.5): F – количество исходной смеси, D – отбор дистиллята, W – отбор кубового продукта, V – количество пара, уходящего с тарелки (паровой поток в колонне), L – количество жидкости, стекающей с тарелки, кмоль/ч; x_f – концентрация НК в питании (исходной смеси), x_0 , x_{N+1} – концентрации НК в кубовом продукте и дистилляте, x_i – концентрация НК в жидкости, стекающей с i -ой тарелки, y_i – концентрация НК в паре уходящего с i -ой тарелки, мол. доли (рис. 3.1).

Принятые допущения позволяют свести процесс массообмена на тарелке к схеме Мерффри [10], т.е. к массообмену при движении некоторого объема паровой фазы через слой жидкости одинаковой концентрации. В этом случае имеем соотношение:

$$\eta_i = \frac{y_i - y_{i-1}}{y_i^* - y_{i-1}}, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (3.6)$$

где η_i – локальный к.п.д. тарелки или КПД Мерффри, y_i^* – концентрация НК в паре, равновесном с жидкостью состава x_i , покидающей тарелку, мол. доли.

Из уравнений (3.6) выразим y_i :

$$y_i = y_{i-1} + \eta(y_i^* - y_{i-1}), \quad (3.7)$$

где η – средний к.п.д. колонны.

Расчет равновесных составов паровой и жидкой фаз осуществляется по уравнению

$$y_i^* = \frac{\alpha_i x_i}{1 + (\alpha_i - 1)x_i}, \quad (3.8)$$

где α_i – коэффициент относительной летучести разделяемой смеси на i -ой тарелке (в расчетах примем $\alpha = \text{const}$).

Записывая приведенные выше уравнения последовательно для тарелок $i = 1, 2, \dots, N$ с учетом равенств:

для куба

$$y_0 = x_0, \quad (3.9)$$

для конденсатора

$$y_N = x_{N+1}, \quad (3.10)$$

и используя уравнения общего материального баланса колонны

$$F = D + W, \quad (3.11)$$

$$L = RD = V - D, \quad (3.12)$$

$$Fx_F = Dx_{N+1} + Wx_0, \quad (3.13)$$

получим математическое описание стационарного режима работы ректификационной колонны. В выражении (3.12) R – флегмовое число, характеризующее отношение расхода флегмы к расходу дистиллята.

Решением системы уравнений (3.1) – (3.13) являются величины x_i и y_i ($i = 0, 1, \dots, N + 1$), т.е. значения концентраций НК на тарелках и в продуктах разделения.

Алгоритм расчета статики процесса

Для расчета статики процесса используется процедура Stat B06 [11]. В качестве независимых переменных выбираются x_0 и R . Определению подлежат величины D , x_{N+1} .

1. Концентрация легколетучего компонента в дистилляте x_{N+1} связана с расходом дистиллята уравнением общего материального баланса (3.12):

$$\bar{x}_{N+1} = \frac{Fx_F - (F-D)x_0}{D}, \quad (3.14)$$

где x_0 задается из области ограничений, накладываемых на состав кубового остатка.

2. Выбирается значение D и по формуле (3.14) определяется \bar{x}_{N+1} . Величина D в каждом цикле расчета вычисляется как среднее арифметическое значений, ограничивающих D слева и справа

$$D = \frac{D_n + D_p}{2}.$$

Для первого цикла:

$$D_n^{(1)} = F \frac{x_F - x_0}{1 - x_0},$$

$$D_p^{(1)} = F,$$

где $D_n^{(1)}$ – минимальный отбор при заданной чистоте кубового остатка x_0 , что соответствует максимальной физически реализуемой чистоте дистиллята, равной единице; $D_p^{(1)}$ максимальное физически реализуемое значение отбора дистиллята, равное расходу питания.

3. По уравнениям общего баланса (3.11), (3.12) рассчитываются величины W и L .

4. С помощью уравнений (3.1) – (3.8) определяется x_i

($i = 1, 2, \dots, N + 1$), при этом $y_0 = x_0$.

Из выражения (3.1):

$$x_1 = \frac{1}{L + F}(Vy_0 + Wx_0) = 0.$$

Равновесная концентрация НК в паровой фазе, находится по уравнению

$$y_1^* = \frac{\alpha_1 x_1}{1 + (\alpha_1 - 1)x_1}.$$

Из (3.7) определяется концентрация y_1 :

$$y_1 = y_0 + \eta(y_1^* - y_0).$$

Далее с помощью уравнения (3.2) определяется x_2 :

$$x_2 = \frac{1}{L + F}V(y_1 - y_0) + x_1.$$

Продолжая расчет для каждой тарелки, определяется x_{N+1} :

$$x_{N+1} = \frac{1}{L + D}Vy_N.$$

5. Проверяется правильность выбора D . Если D выбрано верно, то x_{N+1} должно равняться \bar{x}_{N+1} , рассчитанной по формуле (3.14).

Если $x_{N+1} \neq \bar{x}_{N+1}$, то значение D необходимо изменять до тех пор, пока не выполнится условие

$$|x_{N+1} - \bar{x}_{N+1}| \leq \varepsilon.$$

Направление изменения D следующее: если $x_{N+1} > \bar{x}_{N+1}$, то в качестве правой границы $D_n^{(k+1)}$ берется значение $D^{(k)} = D$ из предыдущего цикла расчета, а левая граница остается прежней

$$D_l^{(k+1)} = D_l^{(k)},$$

далее повторяется расчет при новом среднем

$$D^{(k+1)} = (D_l^{(k+1)} + D_n^{(k+1)})/2.$$

Если же $x_{N+1} < \bar{x}_{N+1}$, то $D^{(k)} = D$ из предыдущего цикла расчета берется в качестве левой границы $D_{\text{л}}^{(k+1)}$, а правая – остается прежней.

В результате расчета статики процесса при некотором флегмовом числе R определяется значение D , которое обеспечивает выполнение условия баланса.

Расчет управляющих параметров процесса ректификации в заданной области изменения состояний входа

С помощью процедуры расчета статики достигаются условия выполнения общего и потарелочного балансов. С точки зрения управления процессом важным является определение расходов флегмы и дистиллята, при которых выполняются требования по качеству продуктов (концентрация НК в дистилляте и кубовом остатке).

Расход флегмы (флегмовое число) определяется методом последовательных приближений, при этом на каждой итерации проводится расчет статики. Если текущее приближение расхода флегмы обеспечивает заданную чистоту продуктов, то процедура поиска прекращается.

В случае поиска управляющих параметров процессом для заданной области изменения входных параметров (состав и расход исходной смеси) поиск значений флегмового числа повторяется для каждого состояния входа. При этом входные параметры определяются комбинированным перебором значений концентрации НК в питании и расхода питания из заданной области (рис. 3.2).

Помимо расходов флегмы и дистиллята управляющими параметрами ректификационной установки являются также расходы греющего пара в кипятильник $G_{\text{г}}$ и хладагента в конденсатор установки $G_{\text{х}}$. С помощью этих параметров регулируются температура и давление в колонне.

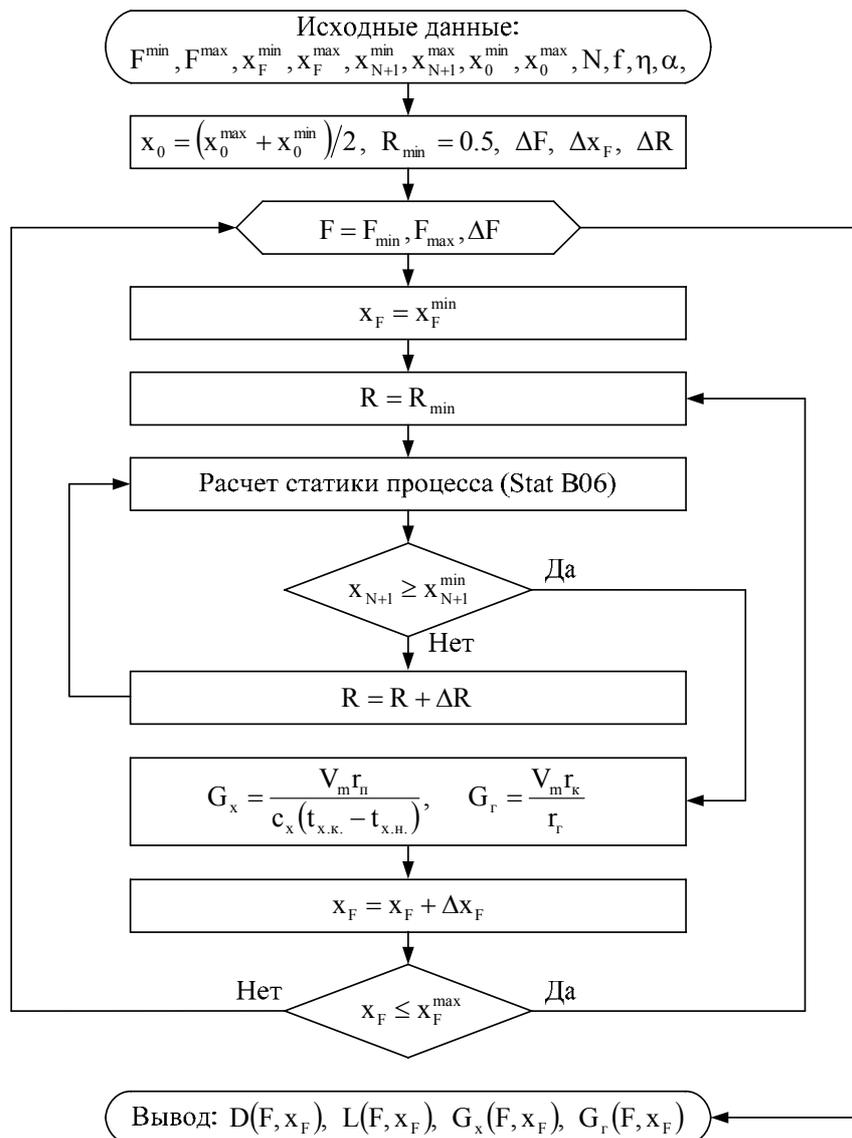


Рис. 3.2. Алгоритм расчета ректификационной установки при изменении расхода и состава исходной смеси в заданной области

Определение требуемых расходов теплоносителей проводится с помощью уравнений теплового баланса, составленных для конденсатора и кипятильника.

$$G_x = \frac{Q_D}{c_x (t_{x.к.} - t_{x.н.})}. \text{ Т.к. } Q_D = V_{п} r_{п}, \text{ то}$$

$$G_x = \frac{V_{п} r_{п}}{c_x (t_{x.к.} - t_{x.н.})},$$

где Q_D – количество тепла, отбираемого в конденсаторе (кДж/ч); c_x – теплоемкость хладагента при средней температуре (кДж/(кг·К)); $t_{x.н.}$, $t_{x.к.}$ – начальная и конечная температуры хладагента; $V_{п}$, $r_{п}$ – массовый расход (кг/ч) и теплота конденсации (кДж/кг) паров, отбираемых с верха колонны.

$$G_r = \frac{Q_K}{r_r} = \frac{V_{п} r_{к}}{r_r},$$

здесь Q_K – количество тепла, подводимого в кипятильник (кДж/ч); r_r – теплота конденсации греющего пара (кДж/кг); $V_{п}$, $r_{к}$ – массовый расход (кг/ч) и теплота испарения (кДж/кг) испаряемой смеси, подводимой в кипятильник из куба колонны.

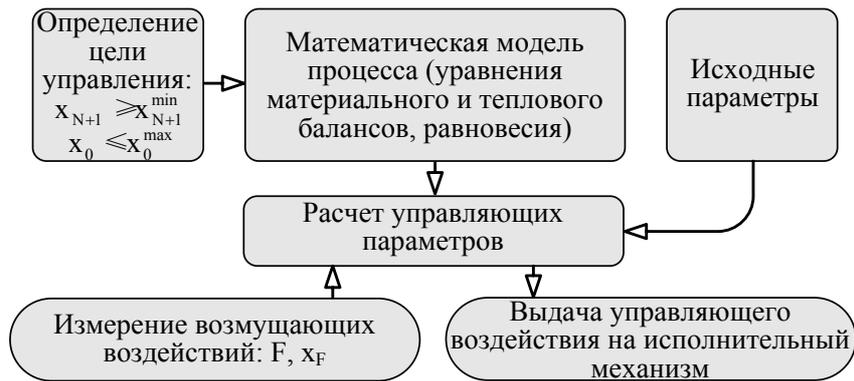


Рис. 3.3. Структура системы управления ректификационной установкой

Использование аналитических зависимостей для определения управляющих параметров процесса может быть применено в системе управления, структура которой представлена на рис. 3.3.

Система управления реализуется на базе контрольно-измерительных приборов и ЭВМ.

Построение функциональной схемы автоматизации

Моделируемая система управления процессом ректификации должна выполнять следующие функции:

- измерение параметров процесса (возмущений: температура, расход и теплофизические свойства исходной смеси; отклонений: расходы флегмы, теплоносителей и продуктов разделения, температура и давление в аппарате, уровень жидкости в кубе и др.);

- расчет управляющих параметров на основе математической модели;

- выдача управляющего воздействия на исполнительный механизм (изменение расходов флегмы, дистиллята, кубового остатка, хладагента, греющего пара).

Для графического отображения структуры и функциональных связей между технологическим процессом и средствами контроля и управления используется функциональная схема автоматизации процесса [6, 7]. Функциональная схема представляется в виде условных обозначений и содержит следующие элементы (рис. 3.4):

- основное технологическое оборудование (ректификационная колонна, теплообменное и насосное оборудование, емкости);

- коммуникации жидкостей, газов и пара (потoki на входе и выходе колонны);

- приборы и средства автоматизации (6,7, приложение I).

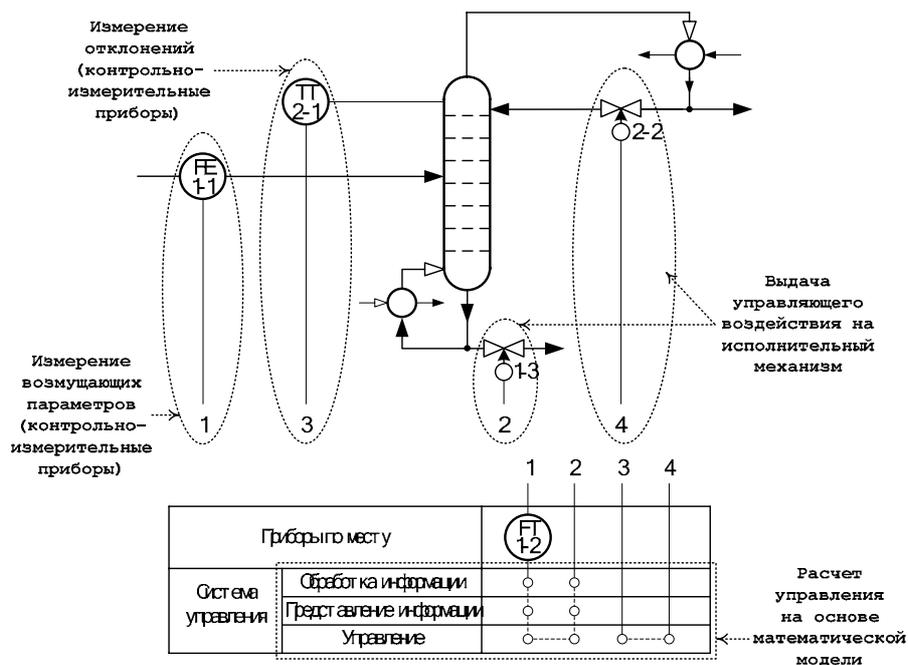


Рис. 3.4. Функциональная схема автоматизации процесса ректификации

Варианты заданий 3а – 3д

Тема курсовой работы: моделирование системы управления процессом бинарной ректификации на основе анализа статических режимов работы установки.

Задание:

– в заданной области изменения входных параметров ректификационной установки разделить бинарной смеси определить значения управляющих параметров процесса (расходы дистиллята, флегмы, греющего пара в кипятильник, хладагента в конденсатор), при которых выполняются требования по качеству получаемых продуктов;

– зависимость значений расхода соответствующих управляющих параметров от состояния входа представить в таблич-

ном и графическом виде;

- построить функциональную схему автоматизации;
- подготовить презентацию курсовой работы и доклад.

Исходные данные:

- 1) расход питания: $F^{\min} \div F^{\max}$;
- 2) содержание НК в питании: $x_F^{\min} \div x_F^{\max}$;
- 3) количество тарелок – N;
- 4) номер тарелки питания – f;
- 5) к.п.д. тарелки – η ;
- 6) коэффициент относительной летучести α (табл. 3.1).

Таблица 3.1

Параметр	Вариант 3а	Вариант 3б	Вариант 3в	Вариант 3г	Вариант 3д
исходная смесь	бензол – толуол	метиловый спирт – вода	двухлористая сера – четырёх- хлористый углерод	пентан – гептан	гексан – октан
F^{\min} , кг/ч	7000	3000	3000	7000	13000
F^{\max} , кг/ч	15000	13000	10000	14000	18000
x_F^{\min} , % масс.	30	20	40	40	50
x_F^{\max} , % масс.	70	40	60	60	70
N, шт.	30	20	20	15	30
f	16	8	9	8	20
η	0.6	0.63	0.57	0.5	0.4
α	2.45	3.8	1.77	6.48	6.1
содержание НК в дистилляте (% масс.), не менее	96	95	85	95	98
содержание ВК в куб. остатке (% масс.), не менее	98	98	88	98	91

IV. МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗАЦИИ РЕАКЦИОННЫМ ПРОЦЕССОМ

План выполнения работы

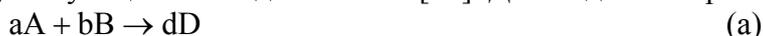
- 1. Изучение реакционного процесса:*
 - основные определения процесса, классификация химических реакторов;
 - основные понятия химической кинетики;
 - математическая модель химического реактора;
 - алгоритм расчета реактора.
- 2. Постановка задачи моделирования в соответствии с заданием на курсовую работу.*
- 3. Разработка моделирующей программы:*
 - алгоритм расчета уравнений кинетики и теплового баланса;
 - алгоритм поиска управляющих параметров процесса (расход реагента, теплоносителя, температуры теплоносителя);
 - код моделирующей программы.
- 4. Анализ и представление результатов моделирования.*
- 5. Анализ реакционного процесса с точки зрения задач управления.*
- 6. Построение функциональной схемы автоматизации объекта.*
- 7. Разработка презентации курсовой работы (не более 8 слайдов, в т.ч. постановка задачи, математическая модель процесса, алгоритмы расчета, результаты моделирования и др.).*
- 8. Подготовка доклада к защите (длительность доклада не более 3-4 мин.).*

Рекомендуемая литература: [5 – 7, 12 – 16].

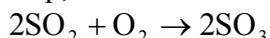
Основные определения процесса, классификация химических реакторов

Химический реактор – это аппарат, в котором осуществляются химические реакции с целью получения необходимых веществ в условиях технологического процесса [13]. Наиболее простой мерой скорости и глубины протекания реакционного процесса служит степень превращения и выход продукта, которые получают определением соотношения количеств исходных веществ и продуктов или же их концентраций в исходной и прореагировавшей газовой (жидкой) смеси.

Степень превращения определяют по основному исходному веществу. Основным исходным называют вещество, по которому идет расчет, как правило, это наиболее дорогое из веществ, присутствующее в исходной смеси [14]. Для модельной реакции



например, для окисления диоксида серы по реакции



основным исходным веществом будет SO_2 , а дешевое – кислород воздуха присутствует в большом избытке.

Общую степень превращения α определяют как отношение массы превратившегося вещества А ($G_{A_{\text{пр}}}$) к общей массе его в исходной смеси $G_{A_{\text{н}}}$. $G_{A_{\text{пр}}}$ включает массу вещества А превратившегося как в целевой продукт, так и в побочные (если они получаются):

$$\alpha_A = \frac{G_{A_{\text{пр}}}}{G_{A_{\text{н}}}}.$$

Для газофазных процессов общую (действительную) степень превращения (конверсии) обычно определяют по замеренным в опыте объемным концентрациям исходного вещества на входе в реактор $c_{A_{\text{н}}}$ и на выходе из него $c_{A_{\text{к}}}$ с поправкой β на

изменение объема смеси вследствие реакции:

$$\alpha = \frac{c_{A_H} - c_{A_K}}{c_{A_H}}. \quad (4.1)$$

Многие процессы органического синтеза являются многомаршрутными, т.е. протекают одновременно по нескольким параллельным и последовательным реакциям с получением побочных продуктов. *Селективностью* (избирательностью) процесса называют отношение количества основного исходного вещества, превратившегося в основной продукт, к общему количеству превратившегося вещества [14].

Выражая химические процессы, в которых кроме целевого продукта D получается один или несколько побочных продуктов N, балансовым уравнением



получаем выражение селективности

$$S = \frac{G_{A \rightarrow D}}{G_{A \rightarrow D} + G_{A \rightarrow N}},$$

где $G_{A \rightarrow D}$ – количество основного исходного вещества A, превратившегося в целевой продукт D; $G_{A \rightarrow N}$ – количество A, превратившегося в побочные продукты.

Селективность можно определить также через степень превращения вещества A:

$$S = \frac{\alpha_{A \rightarrow D}}{\alpha_A},$$

где $\alpha_{A \rightarrow D}$ – степень превращения вещества A в целевой продукт D.

$$\alpha_A = \frac{G_{A \rightarrow D} + G_{A \rightarrow N}}{G_{A_H}}.$$

Выходом продукта называют отношение количества полученного продукта к количеству, которое получилось бы при

полном протекании реакции [14].

Общий выход продукта $x_{\text{п}}$ вычисляют как отношение количества полученного целевого продукта G_{D} к максимально возможному G_{M} при полном превращении исходного А в D по реакции (а) или (б)

$$x_{\text{п}} = \frac{G_{\text{D}}}{G_{\text{M}}}.$$

Условия работы химических реакторов весьма разнообразны: от давления в несколько тысяч мегапаскалей до глубокого вакуума; от глубокого холода до нескольких тысяч градусов; от высоких до низких скоростей потоков вещества через реактор; при наличии нескольких фаз и сложного состава реакционных сред.

В реакторных устройствах при проведении собственно химического превращения осуществляются различные физические процессы (гидродинамические, тепловые, диффузионные и др.), с помощью которых создаются необходимые условия.

Для осуществления физических процессов в реакторных устройствах используются различные конструктивные элементы (мешалки, контактные устройства, теплообменники и др.). Так как сочетаний этих элементов и реакционных процессов может быть много, то и количество реакторных устройств также значительно. Наиболее рациональные признаки классификации химических реакторов следующие [15]:

- способ организации процесса;
- режим движения реакционной смеси;
- тепловой режим в реакторе;
- фазовый состав реакционной смеси;
- конструктивные характеристики реактора.

Способ организации процесса. В реакторе периодического действия рабочий цикл включает загрузку реагирующих веществ, проведение химического или физико-химического пре-

вращения, выгрузку продуктов реакции или физико-химического превращения, подготовку реактора к новому циклу. Производительность такого аппарата ниже производительности реактора непрерывного действия.

В реакторе полунепрерывного действия одну из операций (подачу сырья или вывод готового продукта) проводят периодически. Так, в некоторых случаях накопление целевого продукта отстает от всех предыдущих операций, и тогда целевой продукт выдают по мере его накопления, периодически. Если целевой продукт необходим непрерывно, его подают непрерывно, а сырье – периодически. Производительность такого аппарата также ниже производительности аппарата непрерывного действия, но степень превращения может быть выше, чем в аппарате непрерывного действия.

В реакторе непрерывного действия все операции по получению целевого продукта (подача реагентов, химическое или физико-химическое превращение, вывод получаемого продукта) выполняют одновременно. Затраты времени на загрузку, выгрузку и подготовку аппарата к проведению реакции отсутствуют. На крупнотоннажных химических производствах большая часть или все операции переработки сырья непрерывны.

Режим движения реакционной смеси. В зависимости от гидродинамического режима реакторы подразделяют на реакторы смешения и реакторы вытеснения. В полной мере практически невозможно исключить в реакторах вытеснения некоторое смешение реагирующих компонентов по длине (высоте) реактора. В реакторах смешения также нельзя полностью исключить небольшие зоны неравенства концентраций. Поэтому модели таких реакторов принято называть реакторами идеального смешения (РИС) и реакторами идеального вытеснения (РИВ). С внесением необходимых поправок модели РИС и РИВ можно использовать на практике.

Процесс смешения в РИС должен быть организован таким образом, чтобы в любой точке аппарата были абсолютно одинаковые условия по концентрации реагентов, продуктов реакции, степени

превращения, температуре, скорости химического или физико-химического превращения и т.д.

Тепловой режим в реакторе. Химические или физико-химические превращения, проводимые в реакторах, всегда происходят с выделением или поглощением некоторого количества тепла. По этому признаку реакторы делят на изолированные от окружающей среды – адиабатические, в которых все количество тепла, выделившееся в системе в результате реакции, остается в самой системе (за исключением небольших потерь), и изотермические, когда химическое или физико-химическое превращение необходимо проводить при определенной (заданной) температуре, и в реакторе должен быть организован теплообмен.

Возможен политропический (промежуточный) режим, когда температура в реакторе непостоянна. В реакторах такого типа часть тепла при необходимости подводят к реакционной смеси или, наоборот, отводят от реакционной смеси в зависимости от свойств системы.

Фазовый состав реакционной смеси. В зависимости от фазового состава реакционной смеси различают аппараты для проведения гомогенных процессов для систем газовых, жидкостных и одного твердого тела; реакторы для гетерогенных процессов для систем газ – жидкость, газ – твердое тело, газ – жидкость – твердое тело, жидкость – жидкость (несмешивающиеся), жидкость – твердое тело, два твердых тела; для систем с числом фаз больше трех. К последним относятся и реакторы для гетерогенно-каталитических систем.

Конструктивные характеристики реактора. По конструкции реакторы могут быть разделены на [13]:

- 1) реакторы типа колонны (рис. 4.1 а);
- 2) реакторы типа теплообменника (рис. 4.1 б);
- 3) реакторы типа реакционной камеры (рис. 4.1 в);
- 4) реакторы типа печи (рис. 4.1 г).

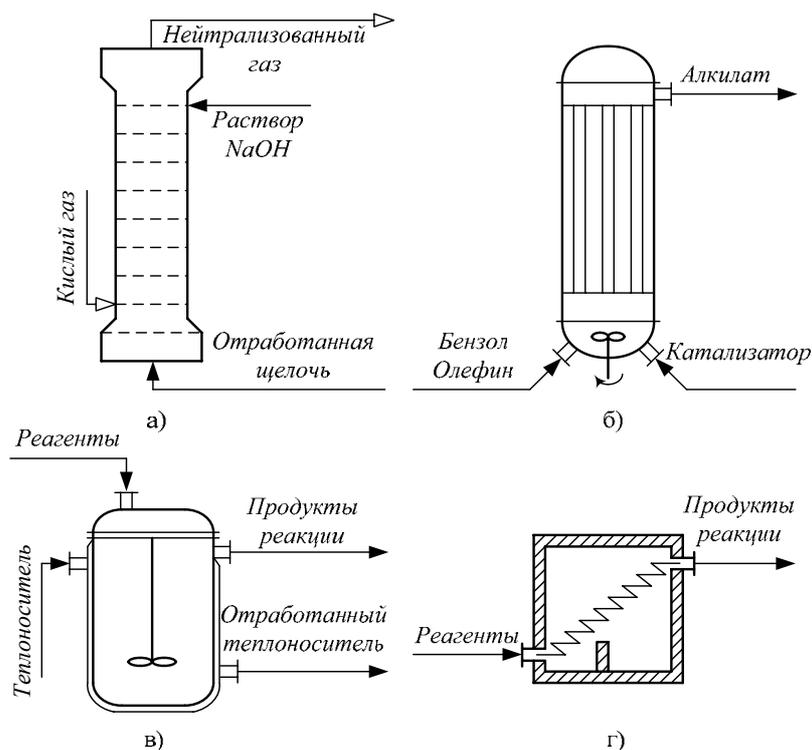


Рис. 4.1. Реакторы: а – колонный, б – трубчатый, в – реакционная камера, г – печь

Расчет реакторных устройств заданной конструкции проводится с целью определения требуемого количества катализатора, расходов теплоносителя и реагирующих веществ, температуры и давления в аппарате, длительности проведения реакции, при которых будет достигнута наибольшая степень превращения исходных компонентов.

Основные понятия химической кинетики

Предметом химической кинетики является исследование закономерностей протекания химических процессов во времени (их скоростей в зависимости от ряда факторов – температуры,

давления, концентраций и др.) и механизмов химических реакций (отдельных стадий и промежуточных веществ). Химическая кинетика позволяет рассчитывать время достижения заданных степеней превращения исходных веществ в процессах и минимизировать это время путем оптимального варьирования факторов, влияющих на скорость реакции [16].

По фазовому принципу химические реакции подразделяются на *гомогенные* и *гетерогенные*.

По термическим показателям реакции делятся на экзотермические, эндотермические, автотермические, изотермические и со смешанным циклом по теплоте реакции. *Экзотермические* реакции протекают с выделением тепла. Следовательно, в реакторах, в которых протекают такого рода реакции, необходимо предусматривать отвод тепла. *Эндотермические* реакции протекают с поглощением тепла, поэтому при осуществлении такого рода реакций в реакторах предусматривается подвод тепла. *Тепловым эффектом* химической реакции называется количество теплоты, выделяемой или поглощаемой в результате химического процесса при постоянном давлении или объеме, равенстве температур исходных веществ или продуктов [13].

Скорость химической реакции r характеризует интенсивность протекания процесса. В общем случае под *скоростью реакции* понимают число актов (химических превращений) в единицу времени в единице реакционного пространства. Для гомогенных процессов реакционное пространство является трехмерным и представляет собой объем реактора (V), для гетерогенных процессов оно двумерное (площадь поверхности границы раздела фаз S). На практике пользуются не числом актов реакции, поскольку эта величина очень большая, а пропорциональными ей параметрами – количеством вещества n , молярной концентрацией c , степенью превращения α .

Для статических условий мгновенная скорость гомогенной химической реакции есть изменение количества вещества како-

го-либо компонента реакционной системы в единицу времени в единице объема:

$$r = -\frac{dn}{Vd\tau} = r_{\text{исх}}, \quad (4.2)$$

$$r' = \frac{dn'}{Vd\tau} = r_{\text{прод}}, \quad (4.3)$$

где $r_{\text{исх}}$, $r_{\text{прод}}$ – скорости по исходному веществу А и продукту А' (моль/(л·с)); n , n' – количество исходного вещества и продукта (моль); V – реакционный объем (л).

В ходе реакции количества исходных веществ во времени убывают ($dn/d\tau < 0$), количества продуктов реакции увеличиваются ($dn'/d\tau > 0$). Скорость является положительной величиной, поэтому в уравнении (4.2) перед производной поставлен знак минус, а в выражении (4.3) плюс. При постоянстве объема системы ($V = \text{const}$)

$$\frac{n}{V} = c, \quad \frac{n'}{V} = c',$$

где c , c' – концентрации исходного вещества и продукта (моль/л). Тогда скорость реакции

$$r_{\text{исх}} = -\frac{dc}{d\tau},$$

$$r_{\text{прод}} = \frac{dc'}{d\tau}.$$

Скорость реакции часто выражают через степень превращения. Из (4.1) следует $c = (1 - \alpha)c_n$. Тогда

$$\frac{dc}{d\tau} = -c_n \frac{d\alpha}{d\tau}.$$

Для гетерогенных процессов

$$r_{\text{исх}} = -\frac{dn}{Sd\tau},$$

где S – площадь поверхности границы раздела фаз (м^2). В данном случае размерность скорости реакции – $\text{моль}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})$.

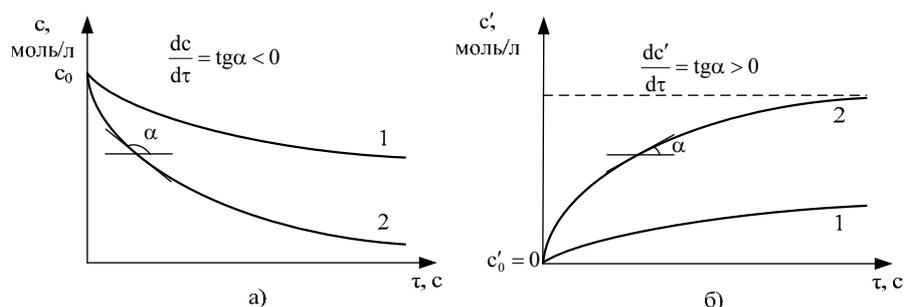


Рис. 4.2. Кинетические кривые для исходных веществ (а) и продукта реакции (б): 1 – медленная реакция, 2 – быстрая реакция

Изучая гомогенные химические процессы в статических условиях легко получить зависимости концентраций исходных веществ c , или продуктов реакции c' от времени τ , которые называются *кинетическими кривыми*. Зависимости $c = f(\tau)$ и $c' = f'(\tau)$ изображены на рис. 4.2. В соответствии с изменением концентраций исходных веществ и продуктов во времени функции $c = f(\tau)$ являются убывающими, а $c' = f'(\tau)$ – возрастающими. Кинетические кривые 1 и 2 относятся к медленной и быстрой реакциям соответственно ($r_1 < r_2$). Производные концентрации по времени, входящие в выражение для мгновенной скорости реакции, находятся как тангенсы углов наклона касательных к кинетическим кривым в соответствующих точках.

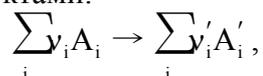
Элементарные химические реакции. Закон действующих масс

Элементарной называется химическая реакция, протекающая в одну стадию (элементарный акт). Большинство химических реакций являются не элементарными, а *сложными*, поскольку они протекают во времени через несколько отличающихся друг от друга элементарных стадий и промежуточных веществ, совокупность которых называют *механизмом* сложной

реакции. В сложных реакциях наряду с расходом реагентов А и образованием продуктов А' на отдельных стадиях возможно образование и расходование *промежуточных веществ* А*, которые в случае достаточной химической устойчивости могут быть выделены и идентифицированы.

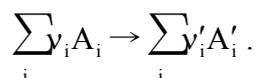
С позиций кинетической обратимости все реакции можно разделить на *двусторонние* (кинетически обратимые), протекающие одновременно как в прямом, так и в обратном направлениях, и *односторонние* (кинетически необратимые), которые идут в одном направлении до практически полного исчерпания хотя бы одного из реагентов.

Химическую реакцию принято записывать в виде стехиометрического уравнения, представляющего собой количественное соотношение (в молях) между исходными реагентами и продуктами:



где ν_i , ν'_i – стехиометрические коэффициенты для исходных веществ и продуктов.

В общем случае для статических условий скорость реакции зависит от температуры, концентраций исходных веществ и продуктов, а также других факторов (катализатор, облучение и др.): $r = f(T, c, c')$. Рассмотрим необратимую элементарную реакцию



Согласно закону действующих масс: *при постоянной температуре скорость элементарной химической реакции пропорциональна произведению концентраций реагирующих веществ в степенях, равных их стехиометрическим коэффициентам*. Это так называемая кинетическая форма закона действующих масс (ЗДМ).

$$r = k \prod_i c_i^{\nu_i},$$

где k – коэффициент пропорциональности, называемый *константой скорости химической реакции*. При единичных концентрациях реагирующих веществ скорость реакции численно равна константе скорости, поэтому k иногда называют удельной скоростью химической реакции. При данной температуре k является для рассматриваемой реакции величиной постоянной, не зависящей от концентраций реагентов.

Рассмотрим необратимые элементарные реакции разного вида и применим к ним закон действующих масс:



Частным кинетическим порядком реакции по i -му компоненту ($\bar{\nu}_i$) называется показатель степени при концентрации этого компонента в уравнении основного постулата химической кинетики. В случае элементарной реакции он совпадает со стехиометрическим коэффициентом при реагенте $\bar{\nu}_i = \nu_i$ и является целым положительным числом.

Общим кинетическим порядком реакции называется сумма частных порядков

$$\bar{\nu} = \sum_i \bar{\nu}_i \quad (\text{для прямой реакции}),$$

$$\bar{\nu}' = \sum_i \bar{\nu}'_i \quad (\text{для обратной реакции}).$$

В общем случае для сложной реакции $\nu_i \neq \bar{\nu}'_i$ и кинетическое уравнение записывается в виде

$$r = k \prod_i c_i^{\bar{\nu}_i},$$

где $\bar{\nu}_i$ – показатель концентрационной зависимости скорости (частный порядок реакции) по i -му компоненту, определяемый экспериментально. Для сложных реакций $\bar{\nu}_i$ может быть целым числом и дробным, положительным и отрицательным.

Рассмотрим зависимость скорости химической реакции от температуры. Температура оказывает на скорость более сильное влияние, чем концентрации реагирующих веществ. При этом температура влияет на скорость через константу скорости: $k = k(T)$.

Исторически известны два вида зависимости константы скорости от температуры: эмпирическое правило Вант-Гоффа и более строгое уравнение Аррениуса.

В области умеренных температур для гомогенных и многих гетерогенных реакций справедливо правило Вант-Гоффа: *при постоянных концентрациях реагирующих веществ увеличение температуры на 10 °С (или 10 К) приводит к возрастанию скорости реакции в 2-4 раза.*

Более строго зависимость константы скорости от температуры выражается уравнением Аррениуса:

$$\ln k = -\frac{A}{T} + B, \quad (4.4)$$

которое показывает, что логарифм (натуральный или десятичный) константы скорости линейно зависит от обратной абсолютной температуры. В уравнении (4.4) A и B – эмпирические константы для данной реакции, которые находят графическим способом. Для этого в так называемых аррениусовых координатах $1/T - \ln k$ строят график по экспериментальным значениям константы скорости изучаемой реакции при различных температурах. Опытные точки в пределах статистического разброса данных находятся на прямой линии (рис. 4.3).

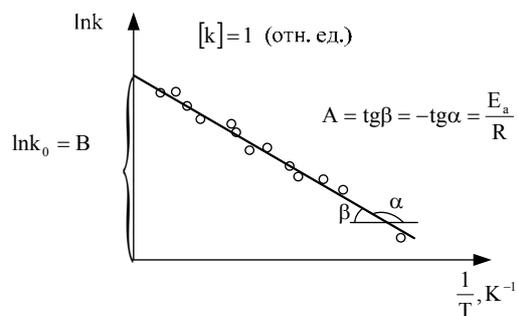


Рис. 4.3. Зависимость константы скорости реакции от абсолютной температуры в аррениусовых координатах

Константа A вычисляется как тангенс угла наклона прямой к оси абсцисс, постоянная B численно равна отрезку, отсекаемому прямой на оси ординат при $1/T = 0$ ($T = \infty$).

При исследовании причин зависимости скорости реакций от температуры вводят понятие энергии активации E_a (Дж/моль). Энергия активации есть минимальная избыточная энергия, которой должны обладать молекулы для протекания реакции. Обычно для химических реакций порядок величины E_a составляет десятки или сотни кДж/моль.

С. Аррениус установил, что энергия активации связана с константой A простым соотношением

$$E_a = AR, \quad (4.5)$$

где R – универсальная газовая постоянная. Подставив в (4.4) величину A из (4.5), получим

$$\ln k = -\frac{E_a}{RT} + B. \quad (4.6)$$

Дифференцируя (4.6) по температуре при $E_a = \text{const}$, придем к выражению

$$\frac{d \ln k}{dT} = \frac{E_a}{RT^2}, \quad (4.7)$$

которое называется уравнением Аррениуса в дифференциаль-

ном виде. Из него путем интегрирования можно снова получить уравнение (4.6), где B – постоянная интегрирования. Обозначив $B = \ln k_0$, из (4.6) получим

$$\ln k = \ln k_0 - \frac{E_a}{RT} \quad (4.8)$$

или

$$k = k_0 e^{-\frac{E_a}{RT}}. \quad (4.9)$$

где k_0 – предэкспоненциальный множитель (предэкспонент) константы скорости реакции. Выражение (4.9) называется уравнением Аррениуса в интегральном виде. Величины E_a и k_0 определяются природой реакции и практически не зависят от температуры. По уравнению Аррениуса константа скорости и скорость реакции экспоненциально зависят от абсолютной температуры.

Энергию активации можно рассчитать по экспериментальным данным графическим или аналитическим способом.

Графический способ заключается в нахождении величины $A = -\operatorname{tg} \alpha$ по графику зависимости $\ln k = f\left(\frac{1}{T}\right)$ для данной реакции с последующим расчетом E_a по уравнению (4.5) (рис. 4.3).

Аналитический способ предполагает применение уравнения (4.8) для двух различных температур ($T_2 > T_1$; $k(T_2) = k_2$; $k(T_1) = k_1$):

$$\ln k_1 = \ln k_0 - \frac{E_a}{RT_1},$$

$$\ln k_2 = \ln k_0 - \frac{E_a}{RT_2}.$$

В результате вычитания второго уравнения из первого получим

$$\ln \frac{k_2}{k_1} = \frac{E_a (T_2 - T_1)}{RT_1 T_2}.$$

По полученному уравнению можно рассчитать энергию активации данной реакции, используя два экспериментальных значения константы скорости при двух различных температурах, или произвести пересчет константы скорости с одной температуры на другую при известной энергии активации.

Математическая модель химического реактора

Процесс химической реакции может проходить в кинетической области, диффузионной области и переходной области.

В общем случае, когда концентрация реагента непостоянна в различных точках реактора или непостоянна во времени, материальный баланс составляют в дифференциальной форме (за объект расчета принята c_A в потоке, проходящем за единицу времени) [12, 15]:

$$\frac{\partial c_A}{\partial \tau} = -\omega_x \frac{\partial c_A}{\partial x} - \omega_y \frac{\partial c_A}{\partial y} - \omega_z \frac{\partial c_A}{\partial z} + D \left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) + r_A, \quad (4.10)$$

где c_A – концентрация вещества А в реакционной смеси; x, y, z – пространственные координаты; D – коэффициент диффузии; $\omega_x, \omega_y, \omega_z$ – составляющие скорости потока (м/с); r_A – скорость превращения исходного компонента А в целевой продукт.

В зависимости от типа физико-химической системы и режима работы реактора уравнение (4.10) можно упростить.

Реактор идеального смешения периодического действия (РИС-П)

РИС-П применяют для простого, одностороннего, изотермического процесса. Так как в РИС-П в каждой точке объема все параметры одинаковы, то производные любого порядка от концентрации по x, y, z равны нулю

$$-\omega_x \frac{\partial c_A}{\partial x} - \omega_y \frac{\partial c_A}{\partial y} - \omega_z \frac{\partial c_A}{\partial z} = 0,$$

$$D \left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) = 0.$$

Уравнение (4.10) принимает вид полного дифференциала:

$$\frac{dc_A}{d\tau} = r_A. \quad (4.11)$$

Реакторы периодического действия эффективны в случае продолжительно протекающих реакций при получении в одном и том же реакторе различных лекарственных препаратов, реактивов, красителей, когда для достижения достаточной степени превращения требуются большие затраты времени, а объем выпускаемого продукта сравнительно невелик.

Реактор идеального смешения непрерывного действия (РИС-Н)

РИС-Н может работать в режиме пуска, нормальной эксплуатации, останова и т.д., т.е. в нестационарном и в стационарном режимах. При большой мощности производства одного и того же продукта предпочтителен РИС-Н со стационарным (неизменным во времени) режимом.

Уравнение материального баланса для РИС-Н можно записать на основе уравнения (4.10) при условии, что

$$-\omega_x \frac{\partial c_A}{\partial x} - \omega_y \frac{\partial c_A}{\partial y} - \omega_z \frac{\partial c_A}{\partial z} = 0,$$

$$D \left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2} \right) = 0.$$

При объемной скорости ($\text{м}^3/\text{с}$) на входе и выходе $W_{\text{ВХ}} = W_{\text{ВЫХ}} = W$ в стационарном режиме:

$$W(c_{A_n} - c_{A_k}) - r_A V = 0, \quad (4.12)$$

где V – объем реактора.

Реактор идеального вытеснения (РИВ)

Конструктивной характеристикой химического реактора вытеснения является отношение длины аппарата к его диаметру $L/D > 100$. Реакционную смесь в аппарат подают непрерывно. Исходные продукты по мере прохождения по длине (высоте) аппарата превращаются в целевые. Химическое или физико-химическое превращение заканчивается на выходе из аппарата.

Гидродинамический режим в РИВ состоит в том, что любая частица сырьевого потока движется только в одном направлении вдоль оси реактора, перемешивания продольные и по диаметру отсутствуют, т.е. объем реагирующих продуктов dV не смешивается с предыдущими и последующими элементами потока (поршневое движение).

Состав каждого элемента потока изменяется в соответствии с термодинамикой и кинетическими особенностями рассматриваемого процесса.

Уравнение (4.10) должно быть скорректировано, так как

$$-\omega_y \frac{\partial c_A}{\partial y} = 0,$$

$$-\omega_z \frac{\partial c_A}{\partial z} = 0.$$

Если направление движения реакционной массы аппарата совпадает с осью x , то

$$W_x \frac{\partial c_A}{\partial x} = W \frac{\partial c_A}{\partial \ell},$$

где ℓ – продольная координата реактора.

В объеме dV реактора идеального вытеснения диффузией можно пренебречь:

$$D = 0.$$

Тогда уравнение материального баланса РИВ при нестационарном режиме имеет вид

$$\frac{\partial c_A}{\partial \tau} = -W \frac{\partial c_A}{\partial \ell} + r_A. \quad (4.13)$$

Модели реакторов с неидеальной структурой потоков

Существуют две модели учета неидеальности потока, в некоторой степени приближающие расчеты к реальным процессам в реакторах.

Первая из них основана на мысленной замене реального реактора некоторой последовательностью идеальных аппаратов (ячеечная модель).

Вторая – на введении большего физического обоснования в системе математического описания процесса, в т.ч. с помощью математического описания процессов обратного перешивания (однопараметрическая диффузионная модель), обратного и радиального перемешивания (двухпараметрическая диффузионная модель).

Ячеечная модель. Реальный аппарат разбивают на N последовательно соединенных реакторов идеального смешения (ячеек). Сумма всех ячеек равна объему проектируемого реактора. Число ячеек – единственный параметр ячейочной модели. Зная необходимое число N , рассчитывают каждую ячейку идеального смешения.

Однопараметрическая диффузионная модель. В отличие от модели идеального вытеснения в диффузионной модели учитывают перемешивание реакционной смеси в осевом направлении, которое происходит в результате турбулентной диффузии. Изменение концентрации реакционного компонента в связи с появлением турбулентной диффузии описывают с применением коэффициента D_T . В расчеты по этой модели вводят допущения: по поперечному сечению реактора состав не изменяется, изменения происходят только вдоль оси аппарата; в аппарате отсутствуют застойные зоны и байпасные потоки.

Уравнение, описывающее нестационарный процесс в ре-

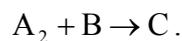
альном реакторе при наличии продольного перемешивания, имеет вид:

$$\frac{\partial c_A}{\partial \tau} = -\omega_x \frac{\partial c_A}{\partial x} + D_T \frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} + r_A. \quad (4.14)$$

Расчет управляющих параметров реакционной установки

Целью расчета реактора заданной конструкции является определение параметров процесса, которые обеспечивают максимальную степень превращения исходного вещества.

Пусть в реактор подается бинарная смесь реагентов, состоящая из компонентов A_1 и A_2 . Параметры смеси: состав (c – концентрация вещества A_1 , мол. доли), расход G_A (моль/с). Кроме того, на вход реактора подается реагент B , который вступает в реакцию с веществами A_1 и A_2 :



Температура реакционной смеси на входе реактора $T_p(0)$ (К) поддерживается изменением расхода горячего теплоносителя G_T (кг/с) в теплообменник, предназначенного для нагревания реакционной смеси.

Если реакция протекает с выделением тепла, то температура в изотермическом реакторе регулируется подачей холодного теплоносителя G_X (кг/с).

Математическое описание реакционного процесса представлено уравнениями кинетики и теплового баланса.

В качестве возмущающего параметра процесса рассматривается изменение состава смеси реагентов A_1 и A_2 (изменение концентрации вещества A_1). Скомпенсировать эти возмущения возможно изменением расходов G_T , G_X и температуры холодного теплоносителя $T_X(0)$ на входе реактора.

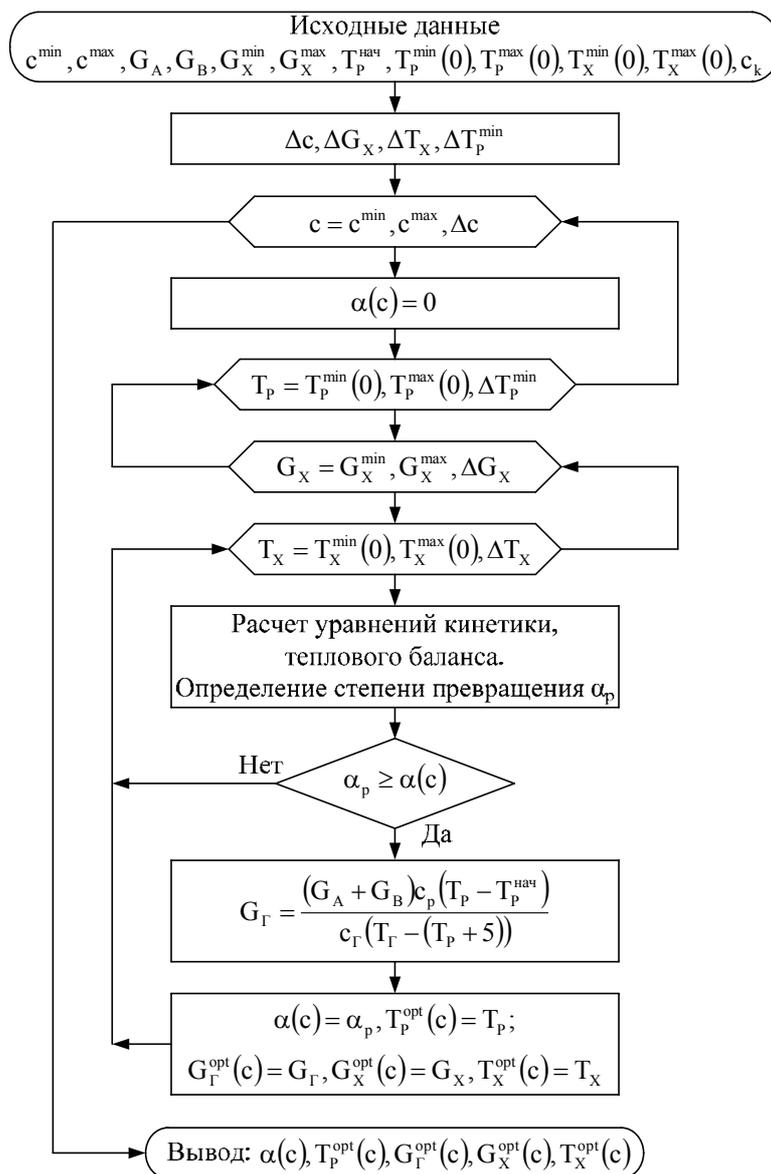


Рис. 4.4. Алгоритм расчета управляющих параметров реакционной установки

Задав значение концентрации c из области возмущений (c^{\min}, c^{\max}) , осуществляется поиск оптимальных значений G_{Γ} , G_X , $T_X(0)$, при которых степень превращения веществ A_1 и A_2 будет максимальной (рис. 4.4). Расчет уравнений кинетики и теплового баланса проводится одним из численных методов. Расход G_{Γ} определяется с помощью уравнения теплового баланса для теплообменника, которое включает: массовые теплоемкости реакционной смеси c_p и горячего теплоносителя c_{Γ} , температуры смеси на входе теплообменника $T_p^{\text{нач}}$ и выходе T_p , температуры теплоносителя на входе T_{Γ} (К).

Использование аналитических зависимостей для определения управляющих параметров может быть реализовано в системе управления, структура которой приведена на рис. 4.5.



Рис. 4.5. Структура системы управления реакционной установкой

Построение функциональной схемы автоматизации

Моделируемая система управления реакционным процессом, реализованная на базе контрольно-измерительных приборов и ЭВМ, должна выполнять следующие функции:

– измерение параметров процесса (возмущений: температура, расход и теплофизические свойства реакционной смеси; отклонений: расходы теплоносителей, катализатора и продуктов

реакции, температура и давление в аппарате и др.);

- расчет управлений на основе математической модели;
- выдача управляющего воздействия на исполнительный механизм (изменение расходов теплоносителей, катализатора, реагентов).

Графически работу системы управления представляют в виде функциональной схемы автоматизации процесса [6, 7]. Схема содержит структуру и функциональные связи между технологическим процессом и средствами контроля и управления. С помощью условных обозначений на схеме (рис. 4.6) показывают:

- основное технологическое оборудование (реакционный аппарат, теплообменное и насосное оборудование и т.д.);
- потоки жидкостей, газов и пара;
- приборы и средства автоматизации (6, 7, приложение I).

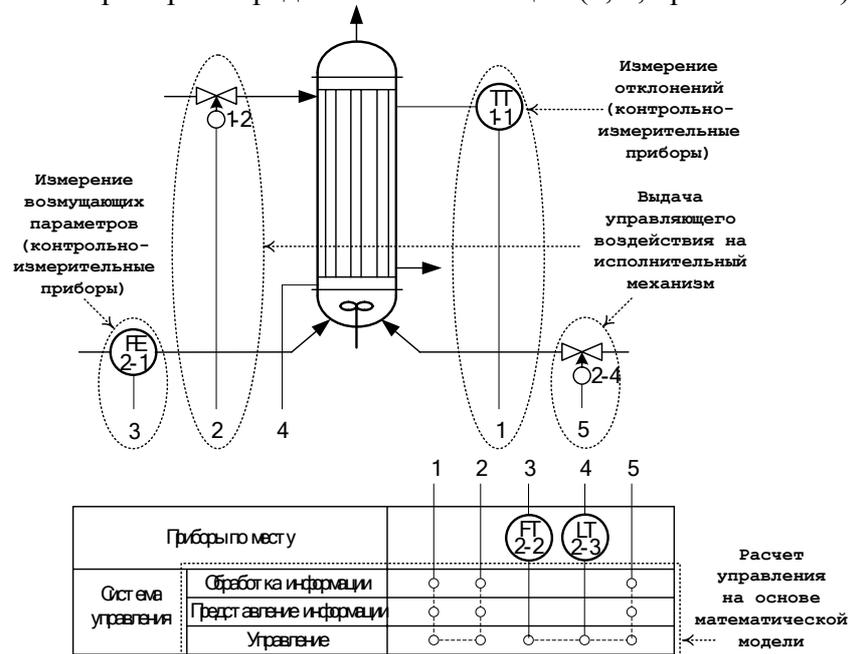


Рис. 4.6. Функциональная схема автоматизации реакционного процесса

Варианты заданий 4а – 4д

Тема курсовой работы: моделирование системы управления реакционным аппаратом на основе анализа уравнений кинетики химической реакции.

Задание:

– исследовать процесс функционирования реактора, предназначенного для получения метил-третамилового эфира (МТАЭ) путем химического взаимодействия метанола с изоамиленами (2-метилбутен-1, 2-метилбутен-2) в присутствии катализатора;

– для заданной области изменения состава смеси изоамиленов определить расход холодного теплоносителя в реактор, температуру теплоносителя и реакционной смеси, при которых степень превращения изоамиленов будет максимальной;

– получить кинетические кривые по длине реактора для одного из составов смеси изоамиленов;

– зависимость расхода нагревающего теплоносителя в теплообменник для нагревания реакционной смеси от состава смеси изоамиленов представить в табличном и графическом виде;

– зависимость расхода холодного теплоносителя в реактор, температуры холодного теплоносителя от состава смеси изоамиленов представить в табличном и графическом виде;

– построить функциональную схему автоматизации технологического процесса;

– разработать презентацию курсовой работы и подготовить доклад к защите.

Исходные данные и описание процесса:

1) Технологическая схема установки состоит из теплообменника и реактора.

2) В целях повышения степени превращения реакционная смесь предварительно нагревается в теплообменнике. Таким образом, температура реакционной смеси на входе реактора под-

держивается изменением расхода горячего теплоносителя в теплообменнике.

3) Реакция взаимодействия изоамиленов с метанолом протекает с выделением тепла, ее проводят в трубчатом реакторе. Для поддержания требуемого температурного режима в межтрубное пространство реактора подается холодный теплоноситель.

4) Реакция описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{dc_{2М61}}{dl} &= -\frac{S}{V} c_k k_1 c_{2М61}, \\ \frac{dc_{2М62}}{dl} &= \frac{S}{V} c_k (-k_2 c_{2М62} + k_3 c_{2М61}), \\ \frac{dc_{МТАЭ}}{dl} &= \frac{S}{V} c_k (k_4 c_{2М61} + k_2 c_{2М62}), \\ \frac{dc_M}{dl} &= \frac{S}{V} c_k (-k_4 c_{2М61} - k_2 c_{2М62}),\end{aligned}$$

где c_i – объемные мольные концентрации компонентов реакционной смеси ($i=1$ – 2-метилбутен-1, $i=2$ – 2-метилбутен-2, $i=3$ – МТАЭ, $i=4$ – метанол); c_k – объемная мольная концентрации катализатора; l – продольная координата реактора (дм); S – свободное сечение трубки реактора; V – объемный расход реакционной смеси в трубке (л/с).

5) Изменение температур реакционной смеси T_p и холодного теплоносителя T_x в реакторе определяются с помощью уравнений теплового баланса:

$$\begin{aligned}\frac{dT_p}{dl} &= \left(\frac{dc_{2М61}}{dl} + \frac{dc_{2М62}}{dl} \right) \frac{\Delta H}{c_p^V} - \frac{K\pi D}{Vc_p^V} (T_p - T_x), \\ \frac{dT_x}{dl} &= \frac{K\pi DN}{G_x c_x} (T_p - T_x),\end{aligned}$$

где ΔH – тепловой эффект реакции; c_p^V – изобарная теплоем-

кость реакционной смеси; K – коэффициент теплопередачи от реакционной массы к теплоносителю через стенки трубки; N , D – количество и диаметр трубок в реакторе; G_X – массовый расход теплоносителя; c_X – массовая теплоемкость теплоносителя.

6) Константы скорости реакции k_i описываются уравнением Аррениуса:

$$k_i = k_{0,i} \exp\left(-\frac{E_i}{RT_p}\right), \quad i = 1,2,3,4.$$

где $k_{0,i}$ – предэкспоненциальный множитель, E_i – энергия активации компонентов, вступающих в реакцию, R – универсальная газовая постоянная.

$$k_{0,1} = \exp(26.79), \quad E_1/R = 9722.54 \text{ Дж/моль};$$

$$k_{0,2} = \exp(29.19), \quad E_2/R = 10986.85 \text{ Дж/моль};$$

$$k_{0,3} = \exp(29.05), \quad E_3/R = 10925.99 \text{ Дж/моль};$$

$$k_{0,4} = \exp(25.05), \quad E_4/R = 9241.97 \text{ Дж/моль}.$$

7) Температура реакционной смеси и горячего теплоносителя на входе теплообменника $T_p^{\text{нач}}$, T_T ; теплоемкость реакционной смеси и горячего теплоносителя c_p , c_T ; длина реактора L ; пределы изменения температуры реакционной смеси на входе реактора $T_p^{\text{min}}(0) \div T_p^{\text{max}}(0)$; пределы изменения температуры теплоносителя на входе реактора $T_X^{\text{min}}(0) \div T_X^{\text{max}}(0)$; расход смеси изоамиленов G_A ; концентрация 2-метил-бутена-1 в смеси изоамиленов $c^{\text{min}} \div c^{\text{max}}$; расход метанола G_B ; пределы изменения расхода теплоносителя $G_X^{\text{min}} \div G_X^{\text{max}}$ (табл. 4.1).

8) Плотности компонентов: $\rho_{2\text{мб1}} = 650 \text{ кг/м}^3$, $\rho_{2\text{мб1}} = 662 \text{ кг/м}^3$, $\rho_{\text{мгаз}} = 743 \text{ кг/м}^3$, $\rho_{\text{м}} = 791 \text{ кг/м}^3$.

Таблица 4.1

Параметр	Вариант 4а	Вариант 4б	Вариант 4в	Вариант 4г	Вариант 4д
L, дм	60	55	50	45	40
S, дм ²	0.0221	0.0221	0.0221	0.0221	0.0221
N	3367	3500	3600	3700	3800
D, дм	0.21	0.2	0.25	0.3	0.3
$\frac{K_s}{\text{Дж}/(\text{дм}^2 \cdot \text{град} \cdot \text{с})}$	0.3	0.3	0.3	0.3	0.3
c _к , моль/л	0.1	0.11	0.12	0.13	0.14
ΔH, Дж/моль	43000	43000	43000	43000	43000
T _Г , К	368	368	368	368	368
T _р ^{нач} , К	310	310	310	310	310
T _р ^{min} (0), К	338	339	335	330	340
T _р ^{max} (0), К	358	360	355	350	360
G _A , моль/с	25	24	26	28	30
c ^{min} , мол. дол.	0.03	0.02	0.01	0.04	0.05
c ^{max} , мол. дол.	0.13	0.15	0.1	0.18	0.20
G _B , моль/с	21	20	22	23	24
c _р , Дж/(кг·град)	2690	2690	2690	2690	2690
c _р ^V , Дж/(л·град)	1830	1830	1830	1830	1830
G _X ^{min} , кг/с	0.1	0.1	0.1	0.1	0.1
G _X ^{max} , кг/с	2	2	2	2	2
T _X ^{min} (0), К	308	313	305	305	300
T _X ^{max} (0), К	323	330	325	320	330
c _X , Дж/(кг·град)	4180	4180	4180	4180	4180
c _Г , Дж/(кг·град)	4190	4190	4190	4190	4190

V. МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМЫ АВТОМАТИЗАЦИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНО-СТАТИСТИЧЕСКИХ МЕТОДОВ

План выполнения работы

- 1. Изучение экспериментально-статистических методов:*
 - методы регрессионного и корреляционного анализа;
 - составление уравнения регрессии методом Брандона;
 - решение задачи планирования и нахождения уравнения регрессии;
 - дробные реплики;
 - описание «почти стационарной» области;
 - ортогональные планы второго порядка.
- 2. Постановка задачи моделирования в соответствии с заданием на курсовую работу.*
- 3. Разработка моделирующей программы:*
 - процедура построения математической модели процесса;
 - алгоритм поиска оптимального решения;
 - код моделирующей программы.
- 4. Анализ и представление результатов моделирования.*
- 5. Построение функциональной схемы автоматизации объекта.*
- 6. Разработка презентации курсовой работы (не более 8 слайдов, в т.ч. постановка задачи, используемые в работе методы построения модели, алгоритмы расчета, результаты моделирования и др.).*
- 7. Подготовка доклада к защите (длительность доклада не более 3-4 мин.).*

Рекомендуемая литература: [6, 9, 12, 17].

Описание экспериментально-статистических методов

В тех случаях, когда информации о рассматриваемом процессе недостаточно или процесс настолько сложен, что невозможно составить его детерминированную модель, прибегают к экспериментально-статистическим методам [12, 17]. Процесс при этом рассматривают как «черный ящик». Различают пассивный и активный эксперимент.

Пассивный эксперимент является традиционным методом, когда ставится большая серия опытов с поочередным варьированием каждой из переменных; к пассивному эксперименту относится также сбор исходного статистического материала в режиме эксплуатации на промышленном объекте. Обработка опытных данных в этом случае для получения математической модели проводится методами классического регрессионного и корреляционного анализа.

Активный эксперимент ставится по заранее составленному плану (планирование эксперимента), при этом предусматривается одновременное изменение всех параметров, влияющих на процесс, что позволяет сразу установить силу взаимодействия параметров и тем самым сократить общее число опытов.

Используя при обработке опытных данных принципы регрессионного и корреляционного анализа, удастся найти зависимость между переменными и условиями оптимума. В обоих случаях математической моделью является *функция отклика*, связывающая параметр оптимизации, характеризующий результаты эксперимента, с переменными параметрами, которыми экспериментатор варьирует при проведении опытов:

$$y = \varphi(x_1, x_2, \dots, x_k).$$

Принято называть независимые переменные x_1, x_2, \dots, x_k факторами, координатное пространство с координатами x_1, x_2, \dots, x_k – факторным пространством, а геометрическое изображение функции отклика в факторном пространстве – поверх-

ностью отклика.

При использовании статистических методов математическая модель представляется в виде полинома – отрезка ряда Тейлора, в который разлагается неизвестная зависимость

$$y = \beta_0 + \sum_{j=1}^k \beta_j x_j + \sum_{u,j=1, u \neq j}^k \beta_{uj} x_u x_j + \sum_{j=1}^k \beta_{jj} x_j^2 + \dots$$

где

$$\beta_j = \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x_j} \right|_{\bar{x}=0}, \quad \beta_{uj} = \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_u \partial x_j} \right|_{\bar{x}=0}, \quad \beta_{jj} = \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_j^2} \right|_{\bar{x}=0}.$$

В связи с тем, что в реальном процессе всегда существуют неуправляемые и неконтролируемые переменные, изменение величины носит случайный характер. Поэтому при обработке экспериментальных данных получают так называемые выборочные коэффициенты регрессии b_0, b_j, b_{uj}, b_{jj} , являющиеся оценками теоретических коэффициентов $\beta_0, \beta_j, \beta_{uj}, \beta_{jj}$. Уравнение регрессии, полученное на основании опыта, запишется следующим образом:

$$\hat{y} = b_0 + \sum_{j=1}^k b_j x_j + \sum_{u,j=1, u \neq j}^k b_{uj} x_u x_j + \sum_{j=1}^k b_{jj} x_j^2 + \dots$$

Коэффициент b_0 называют свободным членом уравнения регрессии; коэффициенты b_j – линейными эффектами; коэффициенты b_{jj} – квадратичными эффектами; коэффициенты b_{uj} – эффектами взаимодействия. Коэффициенты уравнения определяются методом наименьших квадратов из условия:

$$\hat{O} = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 = \min.$$

Здесь N – объем выборки из всей совокупности значений исследуемых параметров. Разность между объемом выборки N и числом связей, наложенных на эту выборку L , называется чис-

лом степеней свободы выборки f :

$$f = N - L.$$

При отыскании уравнения регрессии число связей равно числу определяемых коэффициентов.

Вид уравнения регрессии выбирается путем экспериментального подбора. При изучении зависимости от одного переменного параметра полезно для определения вида уравнения регрессии построить *эмпирическую линию регрессии*.

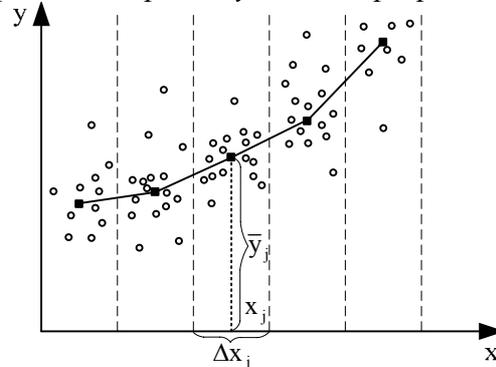


Рис. 5.1. Корреляционное поле

Для этого весь диапазон изменения x на *поле корреляции* разбивается на равные интервалы Δx (рис. 5.1). Все точки, попавшие в интервал Δx_j , относят к его середине x_j . Для этого подсчитывают частные средние:

$$\bar{y}_j = \frac{\sum_{i=1}^{n_j} y_{ji}}{n_j}, \quad \sum_{j=1}^k n_j = N,$$

здесь n_j – число точек в интервале Δx_j , k – число интервалов разбиения, N – объем выборки.

Затем последовательно соединяют точки (x_j, y_j) отрезками прямой. Полученная ломаная линия называется эмпирической линией регрессии y по x . По виду эмпирической линии регрес-

сии можно подобрать уравнение регрессии $\hat{y} = f(x)$.

Задача определения параметров уравнения регрессии (b_0, b_1, b_2, \dots) сводится практически к определению минимума функции многих переменных. Если $\hat{y} = f(x, b_0, b_1, b_2, \dots)$ есть функция дифференцируемая и требуется выбрать b_0, b_1, b_2, \dots так, чтобы

$$\Phi = \sum_{i=1}^N (y_i - f(x_i, b_0, b_1, b_2, \dots))^2 = \min,$$

то необходимым условием минимума $\Phi(b_0, b_1, b_2, \dots)$ является выполнение равенств

$$\frac{\partial \Phi}{\partial b_0} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial b_1} = 0, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial b_2} = 0 \quad \dots$$

или

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^N 2[y_i - f(x_i, b_0, b_1, b_2, \dots)] \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_0} &= 0 \\ \sum_{i=1}^N 2[y_i - f(x_i, b_0, b_1, b_2, \dots)] \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_1} &= 0 \\ \vdots & \end{aligned} \right\}.$$

После преобразований получим:

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^N y_i \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_0} - \sum_{i=1}^N f(x_i, b_0, b_1, b_2, \dots) \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_0} &= 0 \\ \sum_{i=1}^N y_i \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_1} - \sum_{i=1}^N f(x_i, b_0, b_1, b_2, \dots) \frac{\partial f(x_i)}{\partial b_1} &= 0 \\ \vdots & \end{aligned} \right\}.$$

Система, уравнений содержит столько же уравнений,

сколько неизвестных коэффициентов b_0, b_1, b_2, \dots входит в уравнение регрессии и называется в математической статистике *системой нормальных уравнений*.

Величина $\Phi \geq 0$ при любых b_0, b_1, b_2, \dots , следовательно, у нее обязательно должен существовать хотя бы один минимум. Поэтому, если система нормальных уравнений имеет единственное решение, то оно и является минимумом для величины Φ . Решать систему в общем виде нельзя. Для этого надо задаться конкретным видом функции f .

Для оценки силы линейной связи вычисляется выборочный коэффициент корреляции:

$$r^* = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{(N-1)S_x S_y} \quad (5.1)$$

где S_x, S_y – выборочные среднеквадратичные отклонения.

После того как уравнение регрессии найдено, необходимо провести статистический анализ результатов. Этот анализ состоит в следующем: проверяется значимость всех коэффициентов регрессии в сравнении с ошибкой воспроизводимости и устанавливается адекватность уравнения. Такое исследование носит название *регрессионного анализа*.

Методы регрессионного и корреляционного анализа

Для проведения регрессионного анализа необходимо выполнение следующих условий:

1. Входной параметр x измеряется с пренебрежимо малой ошибкой. Появление ошибки в определении y объясняется наличием в процессе не выявленных переменных, не вошедших в уравнение регрессии.

2. Результаты наблюдений над выходными величинами Y_1, Y_2, \dots, Y_N представляют собой независимые нормально

распределенные случайные величины.

3. При проведении эксперимента с объемом выборки N при условии, что каждый опыт повторен m раз, выборочные дисперсии $S_1^2, S_2^2, \dots, S_N^2$ должны быть однородны.

Определение однородности дисперсий сводится к следующему:

1) вычисляется среднее из результатов параллельных опытов:

$$\bar{y}_i = \frac{\sum_{u=1}^m y_{iu}}{m}, \quad i = 1, 2, \dots, N;$$

2) определяются выборочные дисперсии:

$$S_i^2 = \frac{\sum_{u=1}^m (y_{iu} - \bar{y}_i)^2}{m-1}, \quad i = 1, 2, \dots, N;$$

3) находится сумма дисперсий $\sum_{i=1}^N S_i^2$;

4) составляется отношение: $G_{\max} = \frac{S_{\max}^2}{\sum_{i=1}^N S_i^2}$,

где S_{\max}^2 – максимальное значение выборочной дисперсии. Дисперсии однородны в том случае, когда $G_{\max} < G_p(m-1)$, где $G_p(m-1)$ – табулированное значение *критерия Кохрена* при уровне значимости p (обычно $p=0.05$).

Если выборочные дисперсии однородны, рассчитывается дисперсия воспроизводимости:

$$S_{\text{воспр}}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N S_i^2}{N}.$$

Число степеней свободы этой дисперсии равно:

$$f = N(m - 1).$$

Дисперсия воспроизводимости необходима для оценки значимости коэффициентов уравнения регрессии. Оценка значимости коэффициентов производится по критерию *Стьюдента*:

$$t_j = \frac{|b_j|}{S_{b_j}},$$

где b_j – j -ый коэффициент уравнения регрессии; S_{b_j} – среднее квадратичное отклонение j -го коэффициента.

Если t_j больше табулированного $t_p(f)$ [17, приложение 2] для выбранного уровня значимости p и числа степеней свободы f , то коэффициент b_j значимо отличается от нуля. S_{b_j} определяется по закону накопления ошибок:

$$S_{b_j} = \sqrt{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial b_j}{\partial y_i} \right)^2 S_i^2}.$$

Если $S_1^2 = S_2^2 = \dots = S_N^2 = S_{\text{воспр}}^2$, получим:

$$S_{b_j} = \sqrt{\sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial b_j}{\partial y_i} \right)^2 S_{\text{воспр}}^2}.$$

Незначимые коэффициенты исключаются из уравнения регрессии. Оставшиеся коэффициенты пересчитываются заново, поскольку коэффициенты коррелированы друг с другом.

Адекватность уравнения проверяется по критерию *Фишера*:

$$F = \frac{S_{\text{ост}}^2}{S_{\text{воспр}}^2}, \quad (5.2)$$

где $S_{\text{ост}}^2$ – остаточная дисперсия:

$$S_{\text{ин0}}^2 = \frac{m \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - \bar{y}_i)^2}{N - L}.$$

Если отношение (5.2) меньше табличного $F_p(f_1, f_2)$ [17, приложение 3]

$$F < F_p(f_1, f_2), \quad f_1 = N - L, \quad f_2 = N(m - 1),$$

то уравнение адекватно. При отсутствии параллельных опытов и дисперсии воспроизводимости $S_{\text{воспр}}^2$ остаточная дисперсия:

$$S_{\text{ин0}*}^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2}{N - L}.$$

Тогда адекватность принятого уравнения оценивается сравнением $S_{\text{ост}*}^2$ и дисперсии относительно среднего

$$S_y^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{N - 1}$$

по критерию Фишера

$$F = \frac{S_y^2}{S_{\text{ост}*}^2}. \quad (5.2a)$$

В этом случае критерий Фишера показывает, во сколько раз уменьшается рассеяние относительно полученного уравнения регрессии по сравнению с рассеянием относительно среднего. Чем больше значение F превышает табличное:

$$F > F_p(f_1, f_2), \quad f_1 = N - 1, \quad f_2 = N - L$$

тем эффективнее уравнение регрессии для выбранного уровня значимости p и чисел степеней свободы f_1, f_2 .

Метод множественной корреляции

Если необходимо исследовать корреляционную связь меж-

ду многими величинами, пользуются *уравнениями множественной регрессии*:

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_kx_k.$$

Здесь мы имеем дело уже не с линией регрессии, а с поверхностью регрессии при $k = 2$ и с гиперповерхностью при $k > 2$. В общем случае, как указывалось выше, эту поверхность называют поверхностью отклика.

При построении поверхности отклика на координатных осях факторного пространства откладываются численные значения параметров (факторов). Исходный статистический материал представляют в виде (табл. 5.1).

Таблица 5.1

№ опыта	x_1	x_2	x_3	...	x_k	y
1	x_{11}	x_{21}	x_{31}	...	x_{k1}	y_1
2	x_{12}	x_{22}	x_{32}	...	x_{k2}	y_2
3	x_{13}	x_{23}	x_{33}	...	x_{k3}	y_3
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
N	x_{1N}	x_{2N}	x_{3N}	...	x_{kN}	y_N

Прежде всего, перейдем от натурального масштаба к новому, проведя нормировку всех значений случайных величин по формулам:

$$y_i^0 = \frac{y_i - \bar{y}}{S_y}, \quad x_{ji}^0 = \frac{x_{ji} - \bar{x}_j}{S_{x_j}}, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad j = 1, 2, \dots, k,$$

где y_i^0 , x_{ji}^0 – нормированные значения соответствующих факторов; \bar{y} , \bar{x}_j – средние значения факторов; S_y , S_{x_j} – среднеквадратичные отклонения факторов:

$$S_y = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}{N-1}}, \quad S_{x_j} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (x_{ji} - \bar{x}_j)^2}{N-1}}, \quad j = 1, 2, \dots, k.$$

В табл. 5.2 приведен статистический материал в новом

масштабе:

Таблица 5.2

№ опыта	x_1^0	x_2^0	x_3^0	...	x_k^0	y^0
1	x_{11}^0	x_{21}^0	x_{31}^0	...	x_{k1}^0	y_1^0
2	x_{12}^0	x_{22}^0	x_{32}^0	...	x_{k2}^0	y_2^0
3	x_{13}^0	x_{23}^0	x_{33}^0	...	x_{k3}^0	y_3^0
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	⋮
N	x_{1N}^0	x_{2N}^0	x_{3N}^0	...	x_{kN}^0	y_N^0

В новом масштабе имеем:

$$\bar{x}_j^0 = 0, \bar{y}^0 = 0; S_{x_j^0} = 1, S_{y^0} = 1, j = 1, 2, \dots, k.$$

Выборочный коэффициент корреляции (5.1) при этом равен:

$$\left. \begin{aligned} r_{y^0 x_j^0}^* &= \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N y_i^0 x_{ji}^0 \\ r_{x_\ell^0 x_m^0}^* &= \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N x_{\ell i}^0 x_{mi}^0 \end{aligned} \right\} \ell \neq m; \ell, m = 1, 2, \dots, k; j = 1, 2, \dots, k. (5.3)$$

Вычисленный по формулам (5.3) выборочный коэффициент корреляции равен коэффициенту корреляции между переменными, выраженными в натуральном масштабе r_{yx}^* .

Уравнение регрессии между нормированными переменными не имеет свободного члена и принимает вид:

$$\hat{y}^0 = a_1 x_1^0 + a_2 x_2^0 + \dots + a_k x_k^0.$$

Коэффициенты уравнения находятся из условия:

$$\hat{O} = \sum_{i=1}^N (y_i^0 - \hat{y}_i^0)^2 = \min.$$

Условия минимума функции Φ определяются так же, как в случае зависимости от одной переменной:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial a_1} = 0, \frac{\partial \Phi}{\partial a_2} = 0, \dots, \frac{\partial \Phi}{\partial a_k} = 0$$

и система нормальных уравнений принимает вид:

$$\left. \begin{aligned} a_1 \sum_{i=1}^N (x_{1i}^0)^2 + a_2 \sum_{i=1}^N x_{1i}^0 x_{2i}^0 + \dots + a_k \sum_{i=1}^N x_{1i}^0 x_{ki}^0 &= \sum_{i=1}^N x_{1i}^0 y_i^0 \\ a_1 \sum_{i=1}^N x_{2i}^0 x_{1i}^0 + a_2 \sum_{i=1}^N (x_{2i}^0)^2 + \dots + a_k \sum_{i=1}^N x_{2i}^0 x_{ki}^0 &= \sum_{i=1}^N x_{2i}^0 y_i^0 \\ \vdots & \\ a_1 \sum_{i=1}^N x_{ki}^0 x_{1i}^0 + a_2 \sum_{i=1}^N x_{ki}^0 x_{2i}^0 + \dots + a_k \sum_{i=1}^N (x_{ki}^0)^2 &= \sum_{i=1}^N x_{ki}^0 y_i^0 \end{aligned} \right\} (5.4)$$

Умножим левую и правую части уравнений (5.4) на $1/(N-1)$. В результате при каждом коэффициенте a_j ($j=1,2,\dots,k$) получим выборочный коэффициент корреляции r^* . Принимая во внимание:

$$\frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_{ji}^0)^2 = S_{x_j^0}^2 = 1$$

имеем систему нормальных уравнений:

$$\left. \begin{aligned} a_1 + a_2 r_{x_1 x_2}^* + \dots + a_k r_{x_1 x_k}^* &= r_{y x_1}^* \\ a_1 r_{x_1 x_2}^* + a_2 + \dots + a_k r_{x_2 x_k}^* &= r_{y x_2}^* \\ \vdots & \\ a_1 r_{x_k x_1}^* + a_2 r_{x_k x_2}^* + \dots + a_k &= r_{y x_k}^* \end{aligned} \right\} .$$

Следует иметь в виду, что $r_{x_1 x_m}^* = r_{x_m x_1}^*$. Коэффициенты корреляции легко вычисляются простым перемножением соответствующих столбцов таблицы. Для многопараметрических процессов система оказывается высокого порядка и для ее решения необходимо использовать вычислительную машину.

Решив систему, рассчитывают коэффициент множественной корреляции

$$R = \sqrt{a_1 r_{y x_1}^* + a_2 r_{y x_2}^* + \dots + a_k r_{y x_k}^*} .$$

Коэффициент R служит показателем силы связи в случае множественной регрессии $0 \leq R \leq 1$.

Для практического использования уравнения необходимо перейти к натуральному масштабу по формулам:

$$b_j = a_j \frac{S_y}{S_{x_j}}, \quad j = 1, 2, \dots, k;$$

$$b_0 = \bar{y} - \sum_{j=1}^k b_j \bar{x}_j.$$

Определение коэффициентов уравнения регрессии методом Брандона

По этому методу уравнение регрессии записывается в виде:

$$\hat{y} = a f_1(x_1) f_2(x_2) \dots f_j(x_j) \dots f_k(x_k), \quad (5.5)$$

где $f_j(x_j)$ – любая функция величины x_j .

Порядок расположения факторов x_1, x_2, \dots, x_k в выражении (5.5) следующий: чем больше влияние на y оказывает параметр x_j , тем меньше должен быть порядковый номер j . Вид функции выбирается с помощью графических построений. Вначале по точкам выборки системы величин $(y, x_1, x_2, \dots, x_k)$ строятся поле корреляции и эмпирическая линия регрессии $y - x_1$. Таким образом, определяется тип зависимости

$$\hat{y}_{x_1} = f_1(x_1)$$

и методом наименьших квадратов рассчитываются коэффициенты этого уравнения регрессии. Затем составляется выборка новой величины

$$y_1 = \frac{y}{f_1(x_1)}.$$

Эта величина уже не зависит от x_1 , а определяется только

параметрами x_2, x_3, \dots, x_k

$$\hat{y}_1 = af_2(x_2)f_3(x_3)..f_k(x_k).$$

По точкам новой выборки величин y_1 и x_2 вновь строятся корреляционное поле и эмпирическая линия регрессии, характеризующая зависимость y_1 от x_2 :

$$\hat{y}_{x_2} = f_2(x_2).$$

Рассчитываются ее коэффициенты и вновь составляется выборка новой величины

$$y_2 = \frac{y_1}{f_2(x_2)} = \frac{y}{f_1(x_1)f_2(x_2)}.$$

Эта величина не зависит от двух факторов x_1 и x_2 и может быть определена из следующего уравнения регрессии:

$$\hat{y}_2 = af_3(x_3)..f_k(x_k).$$

Такая процедура определения функций продолжается до получения выборки величины:

$$y_k = \frac{y_{k-1}}{f_k(x_k)} = \frac{y}{f_1(x_1)f_2(x_2)..f_k(x_k)}.$$

Величина y_k не зависит от всех факторов x_1, x_2, \dots, x_k и определяется коэффициентом исходного уравнения:

$$\hat{y}_k = a = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_{ki},$$

где N – объем выборки.

Решение задачи планирования и нахождение уравнения регрессии. Полный факторный эксперимент

Методы планирования экспериментов позволяют свести к минимуму число необходимых опытов и одновременно выявить оптимальное значение искомой функции.

Оптимальный двухуровневый план (план 2^k). При планировании экспериментов условия опытов представляют собой фик-

сированное число значений уровней для каждого фактора. Если эксперименты проводятся только на двух уровнях (при двух значениях факторов) и при этом в процессе эксперимента осуществляются все возможные комбинации из k факторов, то постановка опытов по такому плану называется *полным факторным экспериментом (ПФЭ) или планом 2^k* .

Уровни факторов представляют собой в этом случае границы исследуемой области по данному технологическому параметру. Пусть, например, изучается влияние на выход продукта у трех факторов: температуры T в диапазоне $100 - 200$ °С, давления P в диапазоне $2 - 6$ МПа ($20 - 60$ кгс/см²) и времени пребывания t в диапазоне $10 - 30$ мин. Верхний уровень по температуре $z_1^{\max} = 200$ °С, нижний $z_1^{\min} = 100$ °С, $z_1^0 = 150$ °С, $\Delta z_1 = 50$ °С.

Для произвольного j -го фактора:

$$z_j^0 = \frac{z_j^{\max} + z_j^{\min}}{2},$$

$$\Delta z_j = \frac{z_j^{\max} - z_j^{\min}}{2}, \quad j = 1, 2, \dots, k. \quad (5.6)$$

Точка с координатами $(z_1^0, z_2^0, \dots, z_k^0)$ носит название центра плана, иногда ее называют основным уровнем; Δz_j – единица варьирования (интервал варьирования) по оси z_j . От системы координат z_1, z_2, \dots, z_k перейдем к новой безразмерной системе координат x_1, x_2, \dots, x_k . Формула перехода (кодирования):

$$x_j^0 = \frac{z_j - z_j^0}{\Delta z_j}, \quad j = 1, 2, \dots, k. \quad (5.7)$$

В безразмерной системе координат верхний уровень равен $+1$ нижний равен -1 , координаты центра плана равны нулю и совпадают с началом координат. В нашей задаче $k = 3$. Число возможных комбинаций N из трех факторов на двух уровнях равно $N = 2^k = 2^3 = 8$.

Составим план проведения экспериментов (матрицу планирования) (табл. 5.3). Значения выхода y , полученные в результате реализации плана экспериментов, приведены в последнем столбце таблицы.

Таблица 5.3

№ опыта	Значение факторов в натуральном масштабе			Значение факторов в безразмерной системе координат			Выход
	z_1	z_2	z_3	x_1	x_2	x_3	y
1	100	20	10	-1	-1	-1	2
2	200	20	10	+1	-1	-1	6
3	100	60	10	-1	+1	-1	4
4	200	60	10	+1	+1	-1	8
5	100	20	30	-1	-1	+1	10
6	200	20	30	+1	-1	+1	18
7	100	60	30	-1	+1	+1	8
8	200	60	30	+1	+1	+1	12

Запишем кодированную матрицу планирования 2^3 и результаты эксперимента, введя столбец так называемой фиктивной переменной $x_0 = 1$ (табл. 5.4).

Таблица 5.4

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	y
1	+1	-1	-1	-1	y_1
2	+1	+1	-1	-1	y_2
3	+1	-1	+1	-1	y_3
4	+1	+1	+1	-1	y_4
5	+1	-1	-1	+1	y_5
6	+1	+1	-1	+1	y_6
7	+1	-1	+1	+1	y_7
8	+1	+1	+1	+1	y_8

Приведенная в табл. 5.4 матрица планирования обладает следующими свойствами:

- 1) $\sum_{i=1}^N x_{ui} x_{ji} = 0$, $u, j = 0, 1, \dots, k$, $u \neq j$;
- 2) $\sum_{i=1}^N x_{ji} = 0$, $j = 1, 2, \dots, k$;

$$3) \sum_{i=1}^N x_{ji}^2 = N, \quad j = 0, 1, \dots, k,$$

где k – число независимых факторов; N – число опытов в матрице планирования.

Первое свойство – равенство нулю скалярных произведений всех вектор-столбцов – свойство ортогональности матрицы планирования. Благодаря этому свойству резко уменьшаются трудности, связанные с расчетом коэффициентов уравнения регрессии, т.к. матрица коэффициентов нормальных уравнений $(X * X)$ становится диагональной и ее диагональные элементы равны числу опытов в матрице планирования N . Диагональные элементы обратной матрицы $(X * X)^{-1}$:

$$C_{jj} = \frac{1}{N}.$$

Следовательно, любой коэффициент уравнения регрессии b_j определяется скалярным произведением столбца y на соответствующий столбец x_j , деленным на число опытов N :

$$b_j = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ji} y_i. \quad (5.8)$$

Пользуясь планом, представленным в табл. 5.4, можно вычислить коэффициенты регрессии линейного уравнения

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3.$$

Если в рассмотрение ввести более полное уравнение регрессии с коэффициентами взаимодействия:

$$\hat{y} = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + b_3 x_3 + b_{12} x_1 x_2 + b_{13} x_1 x_3 + b_{23} x_2 x_3 + b_{123} x_1 x_2 x_3,$$

то для определения коэффициентов b_{12} , b_{13} , b_{23} (эффектов двойного взаимодействия) и b_{123} (эффекта тройного взаимодействия) необходимо расширить матрицу следующим образом (табл. 5.5).

Если поставить дополнительно параллельные опыты, мож-

но определить $S_{\text{воспр}}^2$, проверить значимость коэффициентов регрессии и при наличии степеней свободы – адекватность уравнения.

Таблица 5.5

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_1x_2	x_1x_3	x_2x_3	$x_1x_2x_3$	y
1	+1	-1	-1	-1	+1	+1	+1	-1	2
2	+1	+1	-1	-1	-1	-1	+1	+1	6
3	+1	-1	+1	-1	-1	+1	-1	+1	4
4	+1	+1	+1	-1	+1	-1	-1	-1	8
5	+1	-1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	10
6	+1	+1	-1	+1	-1	+1	-1	-1	18
7	+1	-1	+1	+1	-1	-1	+1	-1	8
8	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	12

Т.к. корреляционная матрица $(X * X)^{-1}$ для спланированного эксперимента есть матрица диагональная

$$(X * X)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{N} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{N} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{N} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{1}{N} \end{bmatrix}$$

коэффициенты уравнения регрессии некоррелированы между собой. Исключение из уравнения регрессии незначимого коэффициента не скажется на значениях остальных коэффициентов, следовательно, не потребует их повторного пересчета.

Диагональные элементы корреляционной матрицы равны между собой, поэтому все коэффициенты уравнений определяются с одинаковой точностью:

$$S_{b_j} = \frac{S_{\text{воспр}}}{\sqrt{N}}.$$

Дробные реплики

Если при получении уравнения можно ограничиться линейным приближением, то число опытов резко сокращается при использовании так называемых дробных реплик от полного факторного эксперимента или *дробного факторного эксперимента (ДФЭ)*. Для того чтобы дробная реплика представляла собой ортогональный план, в качестве реплики следует брать ближайший полный факторный эксперимент. Число опытов при этом должно быть больше, чем число неизвестных коэффициентов в уравнении регрессии. Допустим, что нам нужно получить линейное приближение некоторого небольшого участка поверхности отклика при трех независимых факторах:

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3.$$

Для решения этой задачи можно ограничиться четырьмя опытами, если в планировании для ПФЭ 2^2 использовать столбец x_1x_2 (табл. 5.6) в качестве плана для x_3 (табл. 5.7).

Таблица 5.6

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2
1	+1	+1	+1	+1
2	+1	-1	-1	+1
3	+1	-1	+1	-1
4	+1	+1	-1	-1

Таблица 5.7

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_3
1	+1	+1	+1	+1
2	+1	-1	-1	+1
3	+1	-1	+1	-1
4	+1	+1	-1	-1

Такой сокращенный план – половина ПФЭ 2^3 – носит название *полуреплики от ПФЭ 2^3* . Пользуясь таким планированием, можно оценить свободный член и три коэффициента уравнения регрессии при линейных членах.

На практике обычно не удастся априори постулировать ра-

венство нулю эффектов взаимодействия, однако часто имеются основания полагать, что некоторые из них малы по сравнению с линейными эффектами. Если коэффициенты регрессии при парных произведениях не равны нулю, то найденные нами коэффициенты будут *смешанными оценками* для генеральных коэффициентов:

$$b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{23}, \quad b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{13}, \quad b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{12}, \quad (5.9)$$

где β – математические ожидания для соответствующих коэффициентов.

Эти генеральные коэффициенты не могут быть отдельно оценены по плану, включающему всего четыре опыта, так как в этом случае неразличимы столбцы для линейных членов и парных произведений. Если, например, в дополнение к столбцам, приведенным в таблице, мы вычисляем еще столбец для произведения x_1x_3 , то увидим, что элементы этого столбца в точности равны элементам столбца x_2 . Таким образом, сокращение числа опытов приводит к получению смешанных оценок для коэффициентов. Для того чтобы определить, какие генеральные коэффициенты смешаны, удобно пользоваться таким приемом: поставив x_3 на место x_1x_2 , получаем соотношение

$$x_3 = x_1x_2,$$

называемое *генерирующим соотношением*. Умножив обе части соотношения на x_3 , слева получим единичный столбец

$$1 = x_1x_2x_3.$$

Произведение носит название *определяющего контраста*, с его помощью удобно определять, в каких столбцах одинаковые элементы. Умножив по очереди определяющий контраст на x_1 , x_2 , x_3 находим:

$$x_1 = x_1^2x_2x_3 = x_2x_3, \quad x_2 = x_1x_3, \quad x_3 = x_1x_2.$$

Полученным соотношениям соответствует система смешанных оценок (5.9).

При использовании ДФЭ необходимо иметь четкое представление о так называемой разрешающей способности дробной реплики, т. е. определить заранее, какие коэффициенты являются несмешанными оценками для соответствующих генеральных коэффициентов. Тогда в зависимости от поставленной задачи подбирается дробная реплика, с помощью которой можно извлечь максимальную информацию из эксперимента.

Например, в задаче с четырьмя факторами $k = 4$, в качестве генерирующего соотношения можно взять

$$x_4 = x_1 x_2 x_3, \quad (5.10)$$

и любой из эффектов двойного взаимодействия, например

$$x_4 = x_1 x_2. \quad (5.11)$$

Матрица планирования с генерирующим соотношением (5.10) приведена в табл. 5.8.

Таблица 5.8

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4
1	+1	+1	+1	+1	+1
2	+1	-1	-1	+1	+1
3	+1	-1	+1	+1	-1
4	+1	+1	-1	+1	-1
5	+1	+1	+1	-1	-1
6	+1	-1	-1	-1	-1
7	+1	-1	+1	-1	+1
8	+1	+1	-1	-1	+1

Воспользовавшись определяющим контрастом $I = x_1 x_2 x_3 x_4$, получим систему смешанных оценок:

$$x_1 = x_2 x_3 x_4, \quad b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{234};$$

$$x_2 = x_1 x_3 x_4, \quad b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{134};$$

$$x_3 = x_1 x_2 x_4, \quad b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{124};$$

$$x_4 = x_1 x_2 x_3, \quad b_4 \rightarrow \beta_4 + \beta_{123};$$

$$x_1 x_2 = x_3 x_4, \quad b_{12} \rightarrow \beta_{12} + \beta_{34};$$

$$x_1 x_3 = x_2 x_4, \quad b_{13} \rightarrow \beta_{13} + \beta_{24};$$

$$x_1 x_4 = x_2 x_3, \quad b_{14} \rightarrow \beta_{14} + \beta_{23}.$$

В реальных задачах тройные взаимодействия бывают равными нулю значительно чаще, чем двойные. Значит, если нас более всего по физическому смыслу задачи интересуют оценки для линейных эффектов, следует брать генерирующее соотношение (5.10). При генерирующем соотношении (5.11) матрица планирования имеет вид (табл. 5.9).

Таблица 5.9

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4
1	+1	+1	+1	+1	+1
2	+1	-1	-1	+1	+1
3	+1	-1	+1	+1	-1
4	+1	+1	-1	+1	-1
5	+1	+1	+1	-1	+1
6	+1	-1	-1	-1	+1
7	+1	-1	+1	-1	-1
8	+1	+1	-1	-1	-1

Определяющий контраст выражается соотношением $1 = x_1 x_2 x_4$. Получается следующая система оценок:

$$x_1 = x_2 x_4, \quad b_1 \rightarrow \beta_1 + \beta_{24};$$

$$x_2 = x_1 x_4, \quad b_2 \rightarrow \beta_2 + \beta_{14};$$

$$x_3 = x_1 x_2 x_3 x_4, \quad b_3 \rightarrow \beta_3 + \beta_{1234};$$

$$x_4 = x_1 x_2, \quad b_4 \rightarrow \beta_4 + \beta_{12};$$

$$x_1 x_3 = x_2 x_3 x_4, \quad b_{13} \rightarrow \beta_{13} + \beta_{234};$$

$$x_2 x_3 = x_1 x_3 x_4, \quad b_{23} \rightarrow \beta_{23} + \beta_{134};$$

$$x_3 x_4 = x_1 x_2 x_4, \quad b_{34} \rightarrow \beta_{34} + \beta_{124}.$$

Следовательно, дробную реплику с генерирующим соотношением (5.11), имеет смысл использовать, если нас более всего интересуют коэффициенты $\beta_3, \beta_{13}, \beta_{23}, \beta_{34}$. Применяют дробные реплики и большей степени дробности (1/4 реплики, 1/8 реплики и т. п.).

Композиционные планы

Полный факторный эксперимент 3^k содержит слишком большое число опытов. Сократить число опытов можно, если воспользоваться так называемыми *композиционными*, или последовательными планами, предложенными Боксом и Уилсоном. «Ядро» таких планов составляет ПФЭ 2^k при $k < 5$ или дробная реплика от него при $k \geq 5$. Если линейное уравнение регрессии оказалось неадекватным, необходимо:

1) добавить $2k$ «звездных» точек, расположенных на координатных осях факторного пространства $(\pm \alpha, 0, 0, \dots, 0)$, $(0, \pm \alpha, 0, \dots, 0)$, ..., $(0, 0, 0, \dots, \pm \alpha)$, где α – расстояние от центра плана до «звездной» точки – «звездное» плечо;

2) увеличить число экспериментов в центре плана n_0 .

Общее число опытов в матрице композиционного плана при k факторах составит:

$$N = 2^k + 2k + n_0, \quad k < 5;$$

$$N = 2^{k-1} + 2k + n_0, \quad k \geq 5.$$

Рассмотрим композиционный план при $k = 2$ (рис. 5.2).

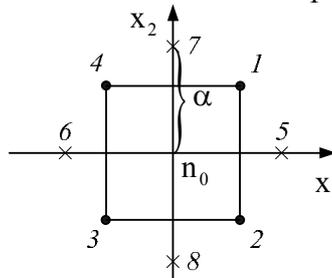


Рис. 5.2. Построение композиционного плана при $k = 2$

Точки 1, 2, 3, 4 образуют ПФЭ 2^2 ; точки 5, 6, 7, 8 – «звездные» точки с координатами $(\pm \alpha, 0)$ и $(0, \pm \alpha)$, координаты опытов в центре плана нулевые $(0, 0)$. Величина α и количество опытов n_0 зависят от выбранного плана.

Ортогональные планы второго порядка

Композиционные планы легко приводятся к ортогональным выбором «звездного» плеча α . На количество опытов n_0 при этом не накладывається никаких ограничений. В этом случае n_0 обычно принимают равным единице.

Возьмем матрицу композиционного планирования для $k = 2$, положив $n_0 = 1$ (табл. 5.10).

Таблица 5.10

№ опыта	x_0	x_1	x_2	x_1x_2	x_1^2	x_2^2
1	+1	+1	+1	+1	+1	+1
2	+1	+1	-1	-1	+1	+1
3	+1	-1	-1	+1	+1	+1
4	+1	-1	+1	-1	+1	+1
5	+1	$+\alpha$	0	0	α^2	0
6	+1	$-\alpha$	0	0	α^2	0
7	+1	0	$+\alpha$	0	0	α^2
8	+1	0	$-\alpha$	0	0	α^2
9	+1	0	0	0	0	0

В общем виде приведенная матрица неортогональна, т.к.:

$$\sum_{i=1}^N x_{0i} x_{ji}^2 \neq 0 \text{ и } \sum_{i=1}^N x_{ji}^2 x_{ui}^2 \neq 0.$$

Приведем матрицу к ортогональному виду. Для этого преобразуем квадратичные переменные:

$$x'_j = x_j^2 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_{ji}^2 = x_j^2 - \overline{x_j^2}.$$

При этом

$$\sum_{i=1}^N x'_{0i} x'_{ji} = \sum_{i=1}^N x_{ji}^2 - N \overline{x_j^2} = 0, \text{ но}$$

$$\sum_{i=1}^N x'_{ji} x'_{ui} \neq 0.$$

Чтобы сделать матрицу планирования полностью ортого-

нальной, величину «звездного» плеча α выбирают из условия равенства нулю недиагонального члена корреляционной матрицы $(X * X)^{-1}$.

Таблица 5.11

	Число независимых факторов k			
	2	3	4	5
«Ядро» плана	2^2	2^3	2^4	2^{5-1}
α	1.00	1.215	1.414	1.547 ($x_5 = x_1 x_2 x_3 x_4$)

В табл. 5.11 приведены значения α для различного числа факторов. Ортогональная матрица 2-го порядка для $k = 2$ принимает вид (табл. 5.12).

Таблица 5.12

№ опыта	x_0	x_1	x_2	$x_1 x_2$	x'_1	x'_2
1	+1	+1	+1	+1	+1/3	+1/3
2	+1	+1	-1	-1	+1/3	+1/3
3	+1	-1	-1	+1	+1/3	+1/3
4	+1	-1	+1	-1	+1/3	+1/3
5	+1	+1	0	0	+1/3	-2/3
6	+1	-1	0	0	+1/3	-2/3
7	+1	0	+1	0	-2/3	+1/3
8	+1	0	-1	0	-2/3	+1/3
9	+1	0	0	0	-2/3	-2/3

В силу ортогональности матрицы планирования все коэффициенты регрессии определяются независимо друг от друга:

$$b_j = \frac{\sum_{i=1}^N x_{ji} y_i}{\sum_{i=1}^N x_{ji}^2}$$

и дисперсии коэффициентов равны:

$$S_{b_j}^2 = \frac{S_{\text{воспр}}^2}{\sum_{i=1}^N x_{ji}^2}.$$

В результате расчетов по матрице с преобразованными столбцами для квадратичных эффектов получим уравнение $\hat{y} = b'_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_kx_k + \dots + b_{(k-1),k}x_{k-1}x_k + b_{11}(x_1^2 - \bar{x}_1^2) + \dots + b_{kk}(x_k^2 - \bar{x}_k^2)$.

Чтобы перейти к обычной записи, определяют b_0 :

$$b_0 = b'_0 - b_{11}\bar{x}_1^2 - \dots - b_{kk}\bar{x}_k^2$$

и оценивают с дисперсией, равной

$$S_{b_0}^2 = S_{b'_0}^2 + (\bar{x}_1^2)^2 S_{b_{11}}^2 + \dots + (\bar{x}_k^2)^2 S_{b_{kk}}^2 .$$

Зная $S_{\text{воспр}}^2$, проверяют значимость коэффициентов и адекватность уравнения

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_kx_k + b_{12}x_1x_2 + \dots + b_{(k-1),k}x_{(k-1)}x_k + b_{11}x_1^2 + \dots + b_{kk}x_k^2 .$$

Адекватность уравнения проверяют по критерию Фишера, составляя отношение

$$F = \frac{S_{\text{ост}}^2}{S_{\text{воспр}}^2} .$$

Уравнение адекватно, если F-отношение меньше табулированного

$$F < F_p(f_1, f_2) ,$$

где p – уровень значимости; f_1 – число степеней свободы остаточной дисперсии; f_2 – число степеней свободы дисперсии воспроизводимости.

Применение экспериментально-статистических методов в задачах управления

Методы регрессионного анализа применяются в целях установления зависимостей между возмущающими параметрами (независимые факторы) и необходимым управлением (функция отклика), между управлениями (независимые факторы) и параметром, характеризующим эффективность процесса (функция отклика).

Расчет управления может проводиться программным путем. Такой метод поиска управления может быть использован в системе управления, реализованной на базе контрольно-измерительных приборов и ЭВМ (рис. 5.3).

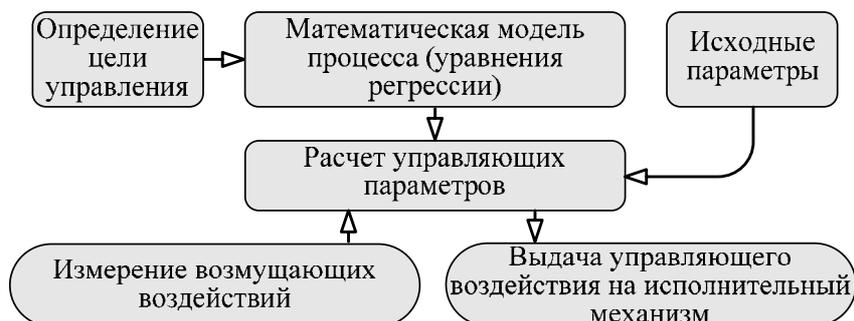


Рис. 5.3. Структура системы управления

Построение функциональной схемы автоматизации

Моделируемая система управления технологическим процессом (теплообменник, абсорбционная установка, реакционный аппарат и др.) должна выполнять следующие функции:

- измерение параметров процесса (возмущений: температура, расход и теплофизические свойства входной смеси; отклонений: расходы теплоносителей, абсорбента, катализатора, выходных продуктов, температура и давление в аппарате и др.);
- расчет управлений на основе математической модели (уравнение регрессии), разработанной на основе экспериментально-статистических методов;
- выдача управляющего воздействия на исполнительный механизм (изменение расходов теплоносителей, флегмы, дистиллята, катализатора и т.д.).

Графически работу системы управления представляют в виде функциональной схемы автоматизации процесса [6, 7]. С помощью функциональной схемы отображают структуру и функциональные связи между технологическим процессом и

средствами контроля и управления. Условными обозначениями на схеме (рис. 5.4) показывают:

- основное технологическое оборудование (ректификационная колонна, абсорбер, теплообменное и насосное оборудование и т.д.);
- потоки жидкостей, газов и пара;
- приборы и средства автоматизации (приложение I).

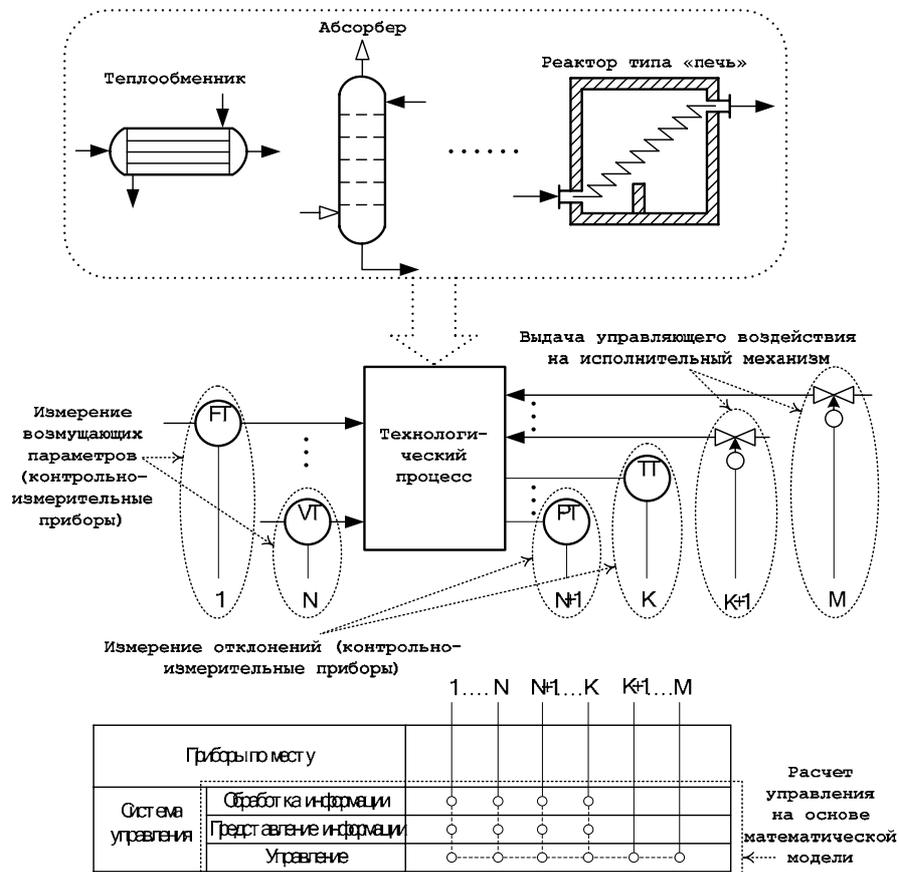


Рис. 5.4. Функциональная схема автоматизации процесса

Варианты заданий 5а – 5д

Вариант 5а

Тема курсовой работы: моделирование системы управления процессом ректификации широкой фракции легких углеводородов на основе экспериментально-статистических методов исследования.

Задание:

– необходимо установить зависимости расхода флегмы в ректификационной колонне разделения широкой фракции легких углеводородов (ШФЛУ) от состава ШФЛУ *методом Брандона*;

– проверить достоверность полученных зависимостей путем анализа погрешностей расчета;

– построить схему регулирования расхода флегмы;

– разработать презентацию курсовой работы и подготовить доклад к защите.

Исходные данные:

По итогам проведения пассивного эксперимента получен следующий статистический материал (табл. 5.13).

Таблица 5.13

№	Состав питания, кг/ч							Расход флегмы, кг/ч
	Этан	Пропан	Изобутан	Бутан	Изопентан	Пентан	Гексан	
1	123.5	3320.8	9534.5	14414.8	5748.7	6201.3	1810.6	18900.0
2	76.0	3811.4	6802.0	14185.4	4636.0	4700.6	3788.6	19400.0
3	117.0	7683.0	6357.0	12811.5	4465.5	3607.5	3958.5	23400.0
4	77.0	5813.5	4235.0	12358.5	5505.5	4312.0	6198.5	17700.0
5	55.0	2145.0	4482.5	8965.0	4207.5	4922.5	2667.5	11100.0
6	212.5	6672.5	8202.5	16745.0	4080.0	3612.5	2975.0	22000.0
7	67.5	3375.0	7965.0	15390.0	4275.0	5040.0	8865.0	17200.0

Достоверность полученных зависимостей проверяется в результате анализа минимального, среднего и максимального значений относительной погрешности Δ (%) расчетного значе-

ния расхода флегмы:

$$\Delta = \frac{|y_i - \hat{y}_i|}{y_i} 100,$$

где y_i – экспериментальное значение расхода флегмы (табл. 5.13); \hat{y}_i – значение расхода флегмы, рассчитанное на основе уравнения регрессии.

Вариант 5б

Тема курсовой работы: моделирование системы управления процессом разложения боратов на основе экспериментально-статистических методов исследования.

Задание:

- необходимо определить условия достижения максимальной степени разложения боратов смесью серной и фосфорной кислот;
- построить функциональную схему автоматизации;
- разработать презентацию курсовой работы и подготовить доклад к защите.

Исходные данные:

Технологическая схема процесса приведена на рис. 5.3.

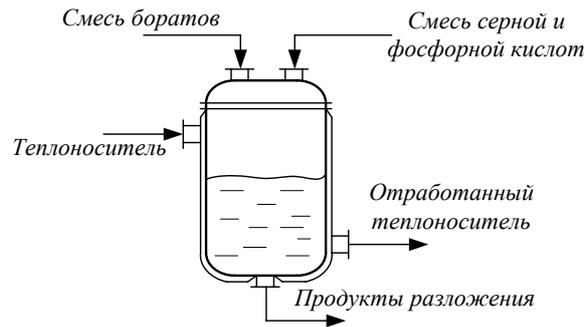


Рис. 5.3.

Факторы, от которых зависит степень разложения y (%):

z_1 – температура реакции (°C);

z_2 – продолжительность реакции (мин.);

z_3 – норма фосфорной кислоты (%);

z_4 – концентрация фосфорной кислоты (% P_2O_5).

Основной уровень и интервал варьирования приведены в табл. 5.14.

Таблица 5.14

	$z_1, ^\circ\text{C}$	$z_2, \text{мин.}$	$z_3, \%$	$z_4, \%$
z_j^0	55.5	37.5	82	34.8
Δz_j	25	21.5	18	18.0

Для получения уравнения регрессии построен ортогональный композиционный план 2-го порядка (табл. 5.15).

Таблица 5.15

№	x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x'_1	x'_2	x'_3	x'_4	x_1x_2	x_1x_3	x_1x_4	x_2x_3	x_2x_4	x_3x_4	y
1	+1	+1	+1	+1	+1	0.2	0.2	0.2	0.2	+1	+1	+1	+1	+1	+1	86.5
2	+1	-1	-1	+1	+1	0.2	0.2	0.2	0.2	+1	-1	-1	-1	-1	+1	40.5
3	+1	+1	-1	-1	+1	0.2	0.2	0.2	0.2	-1	-1	+1	+1	-1	-1	66.1
4	+1	-1	+1	-1	+1	0.2	0.2	0.2	0.2	-1	+1	-1	-1	+1	+1	34.2
5	+1	+1	-1	+1	-1	0.2	0.2	0.2	0.2	-1	+1	-1	-1	+1	-1	75.8
6	+1	-1	+1	+1	-1	0.2	0.2	0.2	0.2	-1	-1	+1	+1	-1	-1	54.7
7	+1	+1	+1	-1	-1	0.2	0.2	0.2	0.2	+1	-1	-1	-1	-1	+1	91.5
8	+1	-1	-1	-1	-1	0.2	0.2	0.2	0.2	+1	+1	+1	+1	+1	+1	47.1
9	+1	+1	-1	+1	+1	0.2	0.2	0.2	0.2	-1	+1	+1	-1	-1	+1	74
10	+1	-1	+1	+1	+1	0.2	0.2	0.2	0.2	-1	-1	-1	+1	+1	+1	53
11	+1	+1	+1	-1	+1	0.2	0.2	0.2	0.2	+1	-1	+1	-1	+1	-1	71.2
12	+1	-1	-1	-1	+1	0.2	0.2	0.2	0.2	+1	+1	-1	+1	-1	-1	30.1
13	+1	+1	+1	+1	-1	0.2	0.2	0.2	0.2	+1	+1	-1	+1	-1	-1	94.8
14	+1	-1	-1	+1	-1	0.2	0.2	0.2	0.2	+1	-1	+1	-1	+1	-1	49.7
15	+1	+1	-1	-1	-1	0.2	0.2	0.2	0.2	-1	-1	-1	+1	+1	+1	66
16	+1	-1	+1	-1	-1	0.2	0.2	0.2	0.2	-1	+1	+1	-1	-1	+1	52.3
17	+1	0	0	0	0	-0.8	-0.8	-0.8	-0.8	0	0	0	0	0	0	62.4
18	+1	1.414	0	0	0	1.2	-0.8	-0.8	-0.8	0	0	0	0	0	0	95.4
19	+1	-1.414	0	0	0	1.2	-0.8	-0.8	-0.8	0	0	0	0	0	0	40.7
20	+1	0	1.414	0	0	-0.8	1.2	-0.8	-0.8	0	0	0	0	0	0	79.3
21	+1	0	-1.414	0	0	-0.8	1.2	-0.8	-0.8	0	0	0	0	0	0	42.9
22	+1	0	0	1.414	0	-0.8	-0.8	1.2	-0.8	0	0	0	0	0	0	77.5
23	+1	0	0	-1.414	0	-0.8	-0.8	1.2	-0.8	0	0	0	0	0	0	58.2
24	+1	0	0	0	1.414	-0.8	-0.8	-0.8	1.2	0	0	0	0	0	0	41.2
25	+1	0	0	0	-1.414	-0.8	-0.8	-0.8	1.2	0	0	0	0	0	0	52.3

В центре плана проведено три дополнительных опыта:
 $y_1^0 = 61.8 \%$, $y_2^0 = 60 \%$, $y_3^0 = 62.3 \%$.

Вариант 5в

Тема курсовой работы: моделирование системы управления процессом ректификации изопентан-пентан-гексановой фракции на основе экспериментально-статистических методов исследования.

Задание:

– необходимо установить зависимость управлений (флегмового числа и расхода греющего пара на обогрев ректификационной колонны) от количества изопентана, пентана и гексана в исходной смеси;

– построить схему регулирования расхода флегмы и греющего пара в кипятильник установки;

– разработать презентацию курсовой работы и подготовить доклад к защите.

Исходные данные:

Для получения уравнения регрессии проведен *полный факторный эксперимент* 2^k , получены значения факторов и функции отклика (табл. 5.16).

Таблица 5.16

№ опыта	Количество изопентана, кг/ч	Количество пентана, кг/ч	Количество гексана, кг/ч	Флегмовое число	Нагрузка на кипятильник, кДж/ч
1	6477.0	6936.0	2640.0	18.0	38476547.9
2	6477.0	6936.0	10185.0	21.0	44546006.0
3	6477.0	10151.0	2640.0	25.0	52670991.5
4	6477.0	10151.0	10185.0	27.0	56719158.0
5	9183.5	6936.0	2640.0	11.0	24296811.9
6	9183.5	6936.0	10185.0	13.0	26300916.3
7	9183.5	10151.0	2640.0	14.5	31399481.9
8	9183.5	10151.0	10185.0	15.5	33423869.8

Вариант 5г

Тема курсовой работы: моделирование системы управления процессом ректификации хлорметил-изобутиленовой фракции на основе экспериментально-статистических методов исследования.

Задание:

- необходимо установить зависимости расхода флегмы в двух последовательно соединенных ректификационных колоннах от количества изобутилена в исходной смеси;
- построить схему регулирования расходов флегмы;
- разработать презентацию курсовой работы и подготовить доклад к защите.

Исходные данные:

Принципиальная технологическая схема процесса приведена на рис. 5.4.

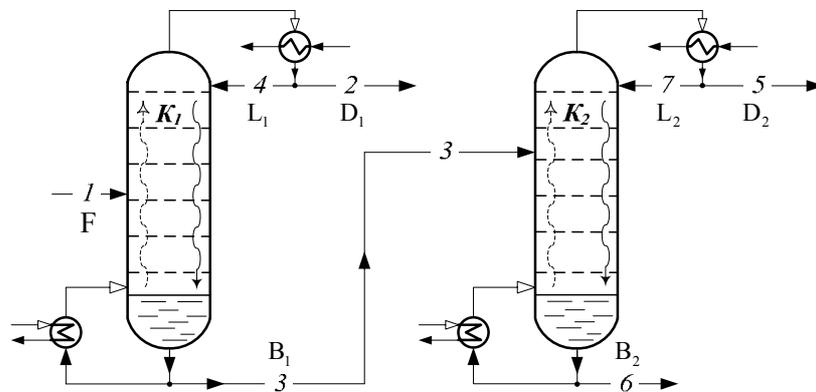


Рис. 5.4. 1 – хлорметил-изобутиленовая фракция; 2, 5 – хлорметилловая фракция; 3 – изобутиленовая фракция с примесью хлорметила; 4, 7 – флегма; 6 – изобутиленовая фракция

Для построения *поля корреляции* и проведения *регрессионного анализа* получен в режиме нормальной эксплуатации следующий статистический материал (табл. 5.17).

Таблица 5.17

Расход изобутилена, кг/ч	Расход флегмы в колонне К ₁ , кг/ч	Расход флегмы в колонне К ₂ , кг/ч
500.0	10000.0	2039.9
750.0	11000.1	3080.2
1000.0	10000.1	5160.0
1250.0	10000.1	5160.4
1500.0	10000.0	5679.9
1750.0	10000.1	6720.0
2000.0	10000.1	6719.9
2250.0	10000.0	7759.4
2500.0	10000.0	7759.4
2750.0	10000.1	9840.4
3000.0	12000.1	10880.2
3250.0	14000.1	11920.1
3500.0	16000.3	14000.1
3750.0	17999.7	15039.8
4000.0	19500.3	15560.1

Вариант 5д

Тема курсовой работы: моделирование системы управления абсорбционной установки для очистки изобутилена от триметилкарбинола на основе экспериментально-статистических методов исследования.

Задание:

- необходимо установить зависимость концентрации триметилкарбинола (ТМК) в очищенной изобутиленовой фракции от давления в абсорбере, начальной температуры загрязненного газа, расхода и температуры абсорбента (воды);
- определить условия процесса, при которых концентрация ТМК на выходе аппарата будет минимальной;
- построить функциональную схему автоматизации установки;
- подготовить презентацию курсовой работы и доклад.

Исходные данные:

Для получения уравнения регрессии проведен *полный*

факторный эксперимент 2^k (табл. 5.18).

Таблица 5.18

№ опыта	Давление, атм	Температура газа, °С	Расход абсорбента, кг/ч	Температура абсорбента, °С	Концентрация ТМК, % масс.
1	1	30	8000	10	0.37
2	1	30	8000	30	0.47
3	1	30	9000	10	0.26
4	1	30	9000	30	0.49
5	1	50	8000	10	0.70
6	1	50	8000	30	0.78
7	1	50	9000	10	0.56
8	1	50	9000	30	0.76
9	1.3	30	8000	10	0.20
10	1.3	30	8000	30	0.42
11	1.3	30	9000	10	0.06
12	1.3	30	9000	30	0.44
13	1.3	50	8000	10	0.45
14	1.3	50	8000	30	0.66
15	1.3	50	9000	10	0.29
16	1.3	50	9000	30	0.67

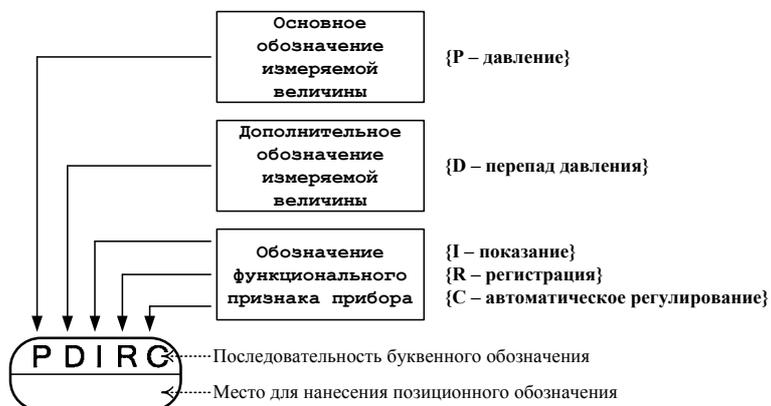
БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Касаткин, А.Г. Основные процессы и аппараты химической технологии / А.Г. Касаткин. – М. : Химия, 1971. – 784 с.
2. Тимонин, А.С. Основы конструирования и расчета химико-технологического и природоохранного оборудования: Справочник. Т. 2. / А.С. Тимонин. – Калуга : Изд-во Н. Бочкаревой, 2002. – 1028 с.
3. Борисов, Г.С. Основные процессы и аппараты химической технологии: пособие по проектированию / Г.С. Борисов [и др.] ; под ред. Ю.И. Дытнерского, 3-е изд., стереотипное. – М. : ООО ТИД «Альянс», 2007. – 496 с. : ил.
4. Павлов, К.Ф. Примеры и задачи по курсу процессов и аппаратов химической технологии: учеб. пособие для вузов / К.Ф. Павлов, П.Г. Романков, А.А. Носков ; под ред. П.Г. Романкова. – 13-е изд., стереотип. Перепечатка с издания 1987 г. – М. : ООО ТИД «Альянс», 2006. – 576 с.
5. Беспалов, А.В. Задачник по системам управления химико-технологическими процессами: Учебное пособие для вузов / А.В. Беспалов, Н.И. Харитонов. – М. : ИКЦ «Академкнига», 2005. – 307 с.
6. Беспалов, А.В. Системы управления химико-технологическими процессами : учебник для вузов / А.В. Беспалов, Н.И. Харитонов. – М. : ИКЦ «Академкнига», 2007. – 690 с. : ил.
7. Фафурин, А.В. Основы проектирования систем автоматизации технологических процессов и аппаратов / А.В. Фафурин, И.А. Дюдина, В.П. Ившин. – Казань : Изд-во Казан. гос. технол. ун-та, 2007. – 174 с.
8. Александров, И.А. Ректификационные и абсорбционные аппараты. Методы расчета и основы конструирования / И.А. Александров. – 3-е изд., перераб. – М. : Химия, 1978. – 280 с. : ил.
9. Галеев, Э.Р. Методы оптимизации : лабораторный практи-

- кум / Э.Р. Галеев, В.В. Елизаров, В.И. Елизаров. – Казань : Изд-во Казан. гос. технол. ун-та, 2006. – 64 с.
10. Павлечко, В.Н. Модели массообменных процессов в ректификационных аппаратах / В.Н. Павлечко. – Мн. : БГТУ, 2005. – 236 с.
 11. Анисимов, И.В. Математическое моделирование и оптимизация ректификационных установок / И.В. Анисимов, В.И. Бодров, В.Б. Покровский. – М. : Химия, 1975. – 216 с.
 12. Кафаров, В.В. Методы кибернетики в химии и химической технологии / В.В. Кафаров. – Изд. 4-е, пер. и доп. – М. : Химия, 1985. – 448 с. ил.
 13. Тимофеев, В.С. Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза : Учеб. пособие для вузов / В.С. Тимофеев, Л.А. Серафимов. – М. : Химия, 1992. – 432 с. : ил.
 14. Мухленов, И.П. Основы химической технологии : Учеб. пособие для студентов хим.-технол. спец. вузов / И.П. Мухленов, А.Е. Горштейн, Е.С. Тумаркина ; Под ред. И.П. Мухленова. – 4-е изд., перераб. и доп. – М. : Высш. шк., 1991. – 463 с. : ил.
 15. Общая химическая технология и основы промышленной экологии / В.И. Ксензенко [и др.]. – 2-е изд., стер. – М. : КолосС, 2003. – 328 с. : ил.
 16. Горбунов, А.И. Теоретические основы общей химии : Учебник для студентов технических университетов и вузов / А.И. Горбунов [и др.]. ; Под ред. А.И. Горбунова. – М. : Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2001. – 720 с.
 17. Гартман, Т.Н. Основы компьютерного моделирования химико-технологических процессов: учеб. пособие для вузов / Т.Н. Гартман, Д.В. Клушин. – М. : ИКЦ «Академкнига», 2006. – 416 с. : ил.

Приложение I. Правила построения условных обозначений приборов и средств автоматизации

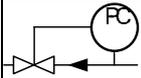
Принцип построения условного обозначения прибора



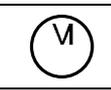
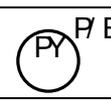
Примеры построения условных обозначений

Обозначение	Наименование
	Первичный измерительный преобразователь (чувствительный элемент) для измерения температуры, установленный по месту. <i>Например: преобразователь термоэлектрический (термопара), термопреобразователь сопротивления, термобаллон манометрического термометра, датчик пирометра и т.п.</i>
	Прибор для измерения температуры показывающий, установленный по месту. <i>Например: термометр ртутный, термометр манометрический.</i>
	Прибор для измерения температуры показывающий, установленный на щите. <i>Например: милливольтметр, логометр, потенциометр, мост автоматический и т.п.</i>
	Прибор для измерения температуры бесшкальный с дистанционной передачей показаний, установленный по месту. <i>Например: термометр манометрический (или любой другой датчик температуры) бесшкальный с пневмо- или электропередачей и т.п.</i>
	Прибор для измерения температуры одноточечный, регистрирующий, установленный на щите. <i>Например: самопишущий милливольтметр, логометр, потенциометр, мост автоматический и т.п.</i>

	Прибор для измерения температуры с автоматическим обегаяющим устройством, регистрирующий, установленный на щите. <i>Например: многоточечный самопишущий потенциометр, мост автоматический и т.п.</i>
	Прибор для измерения температуры регистрирующий, регулирующий, установленный на щите. <i>Например: любой самопишущий регулятор температуры (термометр манометрический, милливольтметр, логометр, потенциометр, мост автоматический и т.п.)</i>
	Регулятор температуры бесшкальный, установленный по месту. <i>Например: дилатометрический регулятор температуры.</i>
	Комплект для измерения температуры регистрирующий, регулирующий, снабженный станцией управления, установленный на щите. <i>Например: вторичный прибор и регулирующий блок системы «Старт».</i>
	Прибор для измерения температуры бесшкальный с контактным устройством, установленный по месту. <i>Например: реле температурное.</i>
	Байпасная панель дистанционного управления, установленная на щите.
	Переключатель электрических цепей измерения (управления), переключатель для газовых (воздушных) линий, установленный на щите.
	Прибор для измерения давления (разрежения) показывающий, установленный по месту. <i>Например: любой показывающий манометр, дифманометр, тягомер, напорометр, вакуумметр и т.п.</i>
	Прибор для измерения перепада давления показывающий, установленный по месту. <i>Например: дифманометр показывающий.</i>
	Прибор для измерения давления (разрежения) бесшкальный с дистанционной передачей показаний, установленный по месту. <i>Например: манометр (дифманометр) бесшкальный с пневмо- или электропередачей.</i>
	Прибор для измерения давления (разрежения) регистрирующий, установленный на щите. <i>Например: самопишущий манометр или любой вторичный прибор для регистрации давления.</i>
	Прибор для измерения давления с контактным устройством, установленный по месту. <i>Например: реле давления.</i>

	Прибор для измерения давления (разрежения) показывающий с контактным устройством, установленный по месту. <i>Например: электроконтактный манометр, вакуумметр и т.п.</i>
	Регулятор давления, работающий без использования постороннего источника энергии (регулятор давления прямого действия) «до себя».
	Первичный измерительный преобразователь (чувствительный элемент) для измерения расхода, установленный по месту. <i>Например: диафрагма, сопло, труба Вентури, датчик индукционного расходомера и т.п.</i>
	Прибор для измерения расхода бесшкальный с дистанционной передачей показаний, установленный по месту. <i>Например: дифманометр (ротаметр), бесшкальный с пневмо- или электропередачей.</i>
	Прибор для измерения соотношения расходов регистрирующий, установленный на щите. <i>Например: любой вторичный прибор для регистрации соотношения расходов.</i>
	Прибор для измерения расхода показывающий, установленный по месту. <i>Например: дифманометр (ротаметр), показывающий.</i>
	Прибор для измерения расхода интегрирующий, установленный по месту. <i>Например: любой бесшкальный счетчик-расходомер с интегратором.</i>
	Прибор для измерения расхода показывающий, интегрирующий, установленный по месту. <i>Например: показывающий дифманометр с интегратором.</i>
	Прибор для измерения расхода интегрирующий, с устройством для выдачи сигнала после прохождения заданного количества вещества, установленный по месту. <i>Например: счетчик-дозатор.</i>
	Первичный измерительный преобразователь (чувствительный элемент) для измерения уровня, установленный по месту. <i>Например: датчик электрического или емкостного уровня.</i>
	Прибор для измерения уровня показывающий, установленный по месту. <i>Например: манометр (дифманометр), используемый для измерения уровня.</i>
	Прибор для измерения уровня с контактным устройством, установленный по месту. <i>Например: реле уровня, используемое для блокировки и сигнализации верхнего уровня.</i>

	Прибор для измерения уровня бесшкальный, с дистанционной передачей показаний, установленный по месту. <i>Например: уровнемер бесшкальный с пневмо- или электропередачей.</i>
	Прибор для измерения уровня бесшкальный, регулирующий, с контактным устройством, установленный по месту. <i>Например: электрический регулятор-сигнализатор уровня. Буква H в данном примере означает блокировку по верхнему уровню.</i>
	Прибор для измерения уровня показывающий, с контактным устройством, установленный на щите. <i>Например: вторичный показывающий прибор с сигнальным устройством. Буквы H и L означают сигнализацию верхнего и нижнего уровней.</i>
	Прибор для измерения плотности раствора бесшкальный, с дистанционной передачей показаний, установленный по месту. <i>Например: датчик плотномер с пневмо- или электропередачей.</i>
	Прибор для измерения размеров показывающий, установленный по месту. <i>Например: показывающий прибор для измерения толщины стальной ленты.</i>
	Прибор для измерения любой электрической величины показывающий, установленный по месту. <i>Например: напряжение*, сила тока*, мощность*. *Надписи, расшифровывающие конкретную измеряемую электрическую величину, располагаются либо рядом с прибором, либо в виде таблицы на поле чертежа.</i>
	Прибор для управления процессом по временной программе, установленный на щите. <i>Например: командный электропневматический прибор (КЭП), многоценное реле времени.</i>
	Прибор для измерения влажности регистрирующий, установленный на щите. <i>Например: вторичный прибор влагомера.</i>
	Первичный измерительный преобразователь (чувствительный элемент) для измерения качества продукта, установленный по месту. <i>Например: датчик pH-метра.</i>
	Прибор для измерения качества продукта показывающий, установленный по месту. <i>Например: газоанализатор показывающий для контроля содержания кислорода в дымовых газах.</i>
	Прибор для измерения качества продукта регистрирующий, регулирующий, установленный на щите. <i>Например: вторичный самопишущий прибор регулятора концентрации серной кислоты в растворе.</i>

	Прибор для измерения радиоактивности показывающий, с контактным устройством, установленный по месту. <i>Например: прибор для показания и сигнализации предельно допустимых концентраций α- и β-лучей.</i>
	Прибор для измерения скорости вращения привода регистрирующий, установленный на щите. <i>Например: вторичный прибор тахогенератора.</i>
	Прибор для измерения нескольких разнородных величин регистрирующий, установленный по месту. <i>Например: самопишущий дифманометр-расходомер с дополнительной записью давления. Надпись, расшифровывающая измеряемые величины, наносится справа от прибора.</i>
	Прибор для измерения вязкости раствора показывающий, установленный по месту. <i>Например: вискозиметр показывающий.</i>
	Прибор для измерения массы продукта показывающий, с контактным устройством, установленный по месту. <i>Например: устройство электронно-тензометрическое, сигнализирующее.</i>
	Прибор для контроля погасания факела в печи бесшкальный, с контактным устройством, установленный на щите. <i>Например: вторичный прибор запально-защитного устройства. Применение резервной буквы B должно быть оговорено на поле схемы.</i>
	Преобразователь сигнала, установленный на щите. Входной сигнал электрический, выходной сигнал тоже электрический. <i>Например: преобразователь измерительный, служащий для преобразования термо э.д.с. термометра термоэлектрического в сигнал постоянного тока.</i>
	Преобразователь сигнала, установленный по месту. Входной сигнал пневматический, выходной – электрический.
	Вычислительное устройство, выполняющее функцию умножения. <i>Например: множитель на постоянный коэффициент K.</i>
	Пусковая аппаратура для управления электродвигателем (включение, выключение насоса; открытие, закрытие задвижки и т.д.). <i>Например: магнитный пускатель, контактор и т.п. Применение резервной буквы N должно быть оговорено на поле схемы.</i>
	Аппаратура, предназначенная для ручного дистанционного управления (включение, выключение двигателя; открытие, закрытие запорного органа, изменение задания регулятору), установленная на щите. <i>Например: кнопка, ключ управления, задатчик.</i>

	<p>Аппаратура, предназначенная для ручного дистанционного управления, снабжения устройством для сигнализации, установленная на щите.</p> <p><i>Например: кнопка со встроенной лампочкой, ключ управления с подвеской и т.п.</i></p>
---	---

Условно-графические обозначения исполнительных механизмов и клапанов

Обозначение	Наименование
	Клапан запорный проходной
	Клапан дроссельный
	Задвижка
	Клапан предохранительный проходной
	Клапан запорный угловой
	Клапан предохранительный угловой
	Исполнительный механизм (общее обозначение)
	Исполнительный механизм нормально закрытый
	Исполнительный механизм с дополнительным ручным приводом
	Клапан обратный проходной
	Редукционный клапан
	Затвор поворотный
	Клапан трехходовой
	Клапан обратный угловой проходной
	Исполнительный механизм нормально открытый
	Исполнительный механизм, оставляющий регулирующий орган в неизменном состоянии
	Отсечной исполнительный механизм

Приложение II
Критические значения коэффициента Стьюдента
(t-критерия) для различных значений уровня значимости ρ
и числа степеней свободы f

f	ρ							
	0.20	0.10	0.05	0.02	0.01	0.005	0.002	0.001
1	3.0770	6.3130	12.7060	31.820	63.656	127.656	318.306	636.619
2	1.8850	2.9200	4.3020	6.964	9.924	14.089	22.327	31.599
3	1.6377	2.3534	3.1820	4.5400	5.840	7.4580	10.214	12.924
4	1.5332	2.1318	2.7760	3.7460	4.604	5.5970	7.1730	8.6100
5	1.4759	2.0150	2.5700	3.6490	4.0321	4.7730	5.8930	6.8630
6	1.4390	1.9430	2.4460	3.1420	3.7070	4.3160	5.2070	5.9580
7	1.4149	1.8946	2.3646	2.9980	3.4995	4.2293	4.7850	5.4079
8	1.3968	1.8596	2.3060	2.8965	3.3554	3.832	4.5008	5.0413
9	1.3830	1.8331	2.2622	2.8214	3.2498	3.6897	4.2968	4.7800
10	1.3720	1.8125	2.2281	2.7638	3.1693	3.5814	4.1437	4.5869
11	1.3630	1.7950	2.2010	2.7180	3.1050	3.4960	4.0240	4.4370
12	1.3562	1.7823	2.1788	2.6810	3.0845	3.4284	3.9290	4.1780
13	1.3502	1.7709	2.1604	2.6503	3.1123	3.3725	3.8520	4.2200
14	1.3450	1.7613	2.1448	2.6245	2.976	3.3257	3.7870	4.1400
15	1.3406	1.7530	2.1314	2.6025	2.9467	3.2860	3.7320	4.0720
16	1.3360	1.7450	2.1190	2.5830	2.9200	3.2520	3.6860	4.0150
17	1.3334	1.7396	2.1098	2.5668	2.8982	3.2224	3.6458	3.9650
18	1.3304	1.7341	2.1009	2.5514	2.8784	3.1966	3.6105	3.9216
19	1.3277	1.7291	2.0930	2.5395	2.8609	3.1737	3.5794	3.8834
20	1.3253	1.7247	2.0860	2.5280	2.8453	3.1534	3.5518	3.8495
21	1.3230	1.7200	2.0790	2.5170	2.8310	3.1350	3.5270	3.8190
22	1.3212	1.7117	2.0739	2.5083	2.8188	3.1188	3.5050	3.7921
23	1.3195	1.7139	2.0687	2.4999	2.8073	3.1040	3.4850	3.7676
24	1.3178	1.7109	2.0639	2.4922	2.7969	3.0905	3.4668	3.7454
25	1.3163	1.7081	2.0595	2.4851	2.7874	3.0782	3.4502	3.7251
26	1.3150	1.7050	2.0590	2.4780	2.7780	3.0660	3.4360	3.7060

27	1.3137	1.7033	2.0518	2.4727	2.7707	3.0565	3.4210	3.6896
28	1.3125	1.7011	2.0484	2.4671	2.7633	3.0469	3.4082	3.6739
29	1.3114	1.6991	2.0452	2.4620	2.7564	3.0360	3.3962	3.8494
30	1.3104	1.6973	2.0423	2.4573	2.7500	3.0298	3.3852	3.6460
32	1.3080	1.6930	2.0360	2.4480	2.7380	3.0140	3.3650	3.6210
34	1.3070	1.6909	2.0322	2.4411	2.7284	3.9520	3.3479	3.6007
36	1.3050	1.6883	2.0281	2.4345	2.7195	3.9490	3.3326	3.5821
38	1.3042	1.6860	2.0244	2.4286	2.7116	3.9808	3.3190	3.5657
40	1.303	1.6839	2.0211	2.4233	2.7045	3.9712	3.3069	3.5510
42	1.320	1.682	2.018	2.418	2.6980	3.6930	3.2960	3.5370
44	1.301	1.6802	2.0154	2.4141	2.6923	3.9555	3.2861	3.5258
46	1.300	1.6767	2.0129	2.4102	2.6870	3.9488	3.2771	3.5150
48	1.299	1.6772	2.0106	2.4056	2.6822	3.9426	3.2689	3.5051
50	1.298	1.6759	2.0086	2.4033	2.6778	3.9370	3.2614	3.4060
55	1.2997	1.673	2.0040	2.3960	2.6680	3.9240	3.2560	3.4760
60	1.2958	1.6706	2.0003	2.3901	2.6603	3.9146	3.2317	3.4602
65	1.2947	1.6686	1.997	2.3851	2.6536	3.9060	3.2204	3.4466
70	1.2938	1.6689	1.9944	2.3808	2.6479	3.8987	3.2108	3.4350
80	1.2820	1.6640	1.9900	2.3730	2.6380	2.8870	3.1950	3.4160
90	1.2910	1.6620	1.9867	2.3885	2.6316	2.8779	3.1833	3.4019
100	1.2901	1.6602	1.9840	2.3642	2.6259	2.8707	3.1737	3.3905
120	1.2888	1.6577	1.9719	2.3578	2.6174	2.8598	3.1595	3.3735
150	1.2872	1.6551	1.9759	2.3515	2.6090	2.8482	3.1455	3.3566
200	1.2858	1.6525	1.9719	2.3451	2.6006	2.8385	3.1315	3.3398
250	1.2849	1.6510	1.9695	2.3414	2.5966	2.8222	3.1232	3.3299
300	1.2844	1.6499	1.9679	2.3388	2.5923	2.8279	3.1176	3.3233
400	1.2837	1.6487	1.9659	2.3357	2.5882	2.8227	3.1107	3.3150
500	1.2830	1.6470	1.9640	2.3330	2.7850	2.8190	3.1060	3.3100

Приложение III
Значения критерия Фишера (F-критерия) для уровня
значимости $p = 0.05$

f_2	f_1													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	14	16	20
1	161	200	216	225	230	234	237	239	241	242	244	245	246	248
2	18.51	19.00	19.16	19.25	19.30	19.33	19.35	19.37	19.38	19.40	19.41	19.42	19.43	19.44
3	10.13	9.55	9.28	9.12	9.01	8.94	8.89	8.85	8.81	8.79	8.74	8.71	8.69	8.66
4	7.71	6.94	6.59	6.39	6.26	6.16	6.09	6.04	6.00	5.96	5.91	5.87	5.84	5.80
5	6.61	5.79	5.41	5.19	5.05	4.95	4.88	4.82	4.77	4.74	4.68	4.64	4.60	4.56
6	5.99	5.14	4.76	4.53	4.39	4.28	4.21	4.15	4.10	4.06	4.00	3.96	3.92	3.87
7	5.59	4.74	4.35	4.12	3.97	3.87	3.79	3.73	3.68	3.64	3.57	3.53	3.49	3.44
8	5.32	4.46	4.07	3.84	3.69	3.58	3.50	3.44	3.39	3.35	3.28	3.24	3.20	3.15
9	5.12	4.26	3.86	3.63	3.48	3.37	3.29	3.23	3.18	3.14	3.07	3.03	2.99	2.93
10	4.96	4.10	3.71	3.48	3.33	3.22	3.14	3.07	3.02	2.98	2.91	2.86	2.83	2.77
11	4.84	3.98	3.59	3.36	3.20	3.09	3.01	2.95	2.90	2.85	2.79	2.74	2.70	2.65
12	4.75	3.89	3.49	3.26	3.11	3.00	2.91	2.85	2.80	2.75	2.69	2.64	2.60	2.54
13	4.67	3.81	3.41	3.18	3.03	2.92	2.83	2.77	2.71	2.67	2.60	2.55	2.51	2.46
14	4.60	3.74	3.34	3.11	2.96	2.85	2.76	2.70	2.65	2.60	2.53	2.48	2.44	2.39
15	4.54	3.68	3.29	3.06	2.90	2.79	2.71	2.64	2.59	2.54	2.48	2.42	2.38	2.33
16	4.49	3.63	3.24	3.01	2.85	2.74	2.66	2.59	2.54	2.49	2.42	2.37	2.33	2.28
17	4.45	3.59	3.20	2.96	2.81	2.70	2.61	2.55	2.49	2.45	2.38	2.33	2.29	2.23
18	4.41	3.55	3.16	2.93	2.77	2.66	2.58	2.51	2.46	2.41	2.34	2.29	2.25	2.19
19	4.38	3.52	3.13	2.90	2.74	2.63	2.54	2.48	2.42	2.38	2.31	2.26	2.21	2.15
20	4.35	3.49	3.10	2.87	2.71	2.60	2.51	2.45	2.39	2.35	2.28	2.22	2.18	2.12
21	4.32	3.47	3.07	2.84	2.68	2.57	2.49	2.42	2.37	2.32	2.25	2.20	2.16	2.10
22	4.30	3.44	3.05	2.82	2.66	2.55	2.46	2.40	2.34	2.30	2.23	2.17	2.13	2.07
23	4.28	3.42	3.03	2.80	2.64	2.53	2.44	2.37	2.32	2.27	2.20	2.15	2.11	2.05
24	4.26	3.40	3.01	2.78	2.62	2.51	2.42	2.36	2.30	2.25	2.18	2.13	2.09	2.03
25	4.24	3.39	2.99	2.76	2.60	2.49	2.40	2.34	2.28	2.24	2.16	2.11	2.07	2.01

Приложение IV
Значения критерия Фишера (F-критерия) для уровня
значимости $p = 0.01$

f_2	f_1													
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	12	14	16	20
1	4052	4999	5403	5625	5764	5859	5928	5981	6022	6056	6106	6143	6169	6209
2	98.50	99.00	99.17	99.25	99.30	99.33	99.36	99.37	99.39	99.40	99.42	99.43	99.44	99.45
3	34.12	30.82	29.46	28.71	28.24	27.91	27.67	27.49	27.34	27.23	27.05	26.92	26.83	26.69
4	21.20	18.00	16.69	15.98	15.52	15.21	14.98	14.80	14.66	14.55	14.37	14.25	14.15	14.02
5	16.26	13.27	12.06	11.39	10.97	10.67	10.46	10.29	10.16	10.05	9.89	9.77	9.68	9.55
6	13.74	10.92	9.78	9.15	8.75	8.47	8.26	8.10	7.98	7.87	7.72	7.60	7.52	7.39
7	12.25	9.55	8.45	7.85	7.46	7.19	7.00	6.84	6.72	6.62	6.47	6.36	6.27	6.16
8	11.26	8.65	7.59	7.01	6.63	6.37	6.18	6.03	5.91	5.81	5.67	5.56	5.48	5.36
9	10.56	8.02	6.99	6.42	6.06	5.80	5.61	5.47	5.35	5.26	5.11	5.00	4.92	4.81
10	10.04	7.56	6.55	5.99	5.64	5.39	5.20	5.06	4.94	4.85	4.71	4.60	4.52	4.41
11	9.65	7.21	6.22	5.67	5.32	5.07	4.89	4.74	4.68	4.54	4.40	4.29	4.21	4.10
12	9.33	6.93	5.95	5.41	5.06	4.82	4.64	4.50	4.39	4.30	4.22	4.05	3.97	3.86
13	9.07	6.70	5.74	5.21	4.86	4.62	4.44	4.30	4.19	4.10	3.96	3.86	3.78	3.66
14	8.86	6.51	5.56	5.04	4.70	4.46	4.28	4.14	4.03	3.94	3.80	3.70	3.62	3.51
15	8.68	6.36	5.42	4.89	4.56	4.32	4.14	4.00	3.89	3.80	3.67	3.56	3.49	3.37
16	8.53	6.23	5.29	4.77	4.44	4.20	4.03	3.89	3.78	3.69	3.55	3.45	3.37	3.26
17	8.40	6.11	5.18	4.67	4.34	4.10	3.93	3.79	3.68	3.59	3.46	3.35	3.27	3.16
18	8.29	6.01	5.09	4.58	4.05	4.01	3.84	3.71	3.60	3.51	3.37	3.27	3.19	3.08
19	8.18	5.93	5.01	4.50	4.17	3.94	3.77	3.63	3.52	3.43	3.30	3.19	3.12	3.00
20	8.10	5.85	4.94	4.43	4.10	3.87	3.70	3.56	3.46	3.37	3.23	3.13	3.05	2.94
21	8.02	5.78	4.87	4.37	4.04	3.81	3.64	3.51	3.40	3.31	3.17	3.07	2.99	2.88
22	7.95	5.72	4.82	4.81	3.99	3.76	3.59	3.45	3.35	3.26	3.12	3.02	2.94	2.83
23	7.88	5.66	4.76	4.26	3.94	3.71	3.54	3.41	3.30	3.21	3.07	2.97	2.89	2.78
24	7.82	5.61	4.72	4.22	3.90	3.67	3.50	3.36	3.26	3.17	3.03	2.93	2.85	2.74
25	7.77	5.57	4.68	4.18	3.86	3.63	3.46	3.32	3.22	3.13	2.99	2.89	2.81	2.70

Приложение V

Содержание отчета по курсовой работе

В отчет по курсовой работе должны быть включены следующие разделы:

- 1) постановка задачи;
- 2) краткая характеристика объекта моделирования;
- 3) метод составления модели процесса или зависимости ее параметров*;
- 4) математическое описание процесса**;
- 5) алгоритм решения задачи;
- 6) результаты моделирования;
- 7) перечень возмущающих, регулирующих воздействий, регулируемых параметров процесса**;
- 8) схема автоматизации процесса;
- 9) выводы по проделанной работе;
- 10) список использованных источников.
- 11) приложение (листинг моделирующей программы).

** рассмотреть в отчете по работе «Моделирование системы управления с применением экспериментально-статистических методов исследования»;*

*** исключить из отчета по работе «Моделирование системы управления с применением экспериментально-статистических методов исследования».*

Рекомендуемый объем отчета: 20-25 с.

Требования по оформлению (не распространяются на листинг программы): шрифт – Times New Roman (14 pt), межстрочный интервал – полуторный, выравнивание – по ширине. Набор формул производить в редакторе формул Microsoft Equation (размеры и стиль – по умолчанию).

Учебное издание

Елизаров Виталий Викторович
доктор технических наук

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СИСТЕМ
АВТОМАТИЗАЦИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ
ПРОЦЕССОВ**

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

Корректор Габдурахимова Т.М.
Худ. редактор Федорова Л.Г.

Сдано в набор 26.12.2012.
Подписано в печать 28.12.2012.
Бумага писчая. Гарнитура Таймс.
Усл. печ. л. 8. Тираж 100.
Заказ №65.

НХТИ (филиал) ФГБОУ ВПО «КНИТУ»,
г. Нижнекамск, 423570, ул.30 лет Победы, д.5а.

