В.И. Божко

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВХОДНЫХ СЛУЧАЙНЫХ ПРОЦЕССОВ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

УДК 681.5+66.01

Показано, что учет случайных составляющих входных и выходных параметров химико-технологических объектов (ХТО) позволяет определить более тонкие характеристики их функционирования. Проведен анализ входных случайных процессов ХТО и предложен их алгоритм моделирования, основанный на методе формирующего фильтра.

При осуществлении процессов химической технологии используются интенсивные режимы работы аппаратов, при которых значения гидродинамических и ряда других параметров процесса испытывают значительные флуктуации [1]. Наличие подобных флуктуаций существенно влияет на интенсивность массо- и энергообмена. Поэтому при исследовании действующих и вновь проектируемых процессов химической технологии необходимо знать вероятностные характеристики выходных параметров процесса, т.е. вычислять не только средние значения выходных параметров процесса (например, концентрации целевого вещества на выходе из аппарата), но и значения величин, характеризующих флуктуации этих параметров во времени. Данные характеристики используются для более тонкой оценки эффективности функционирования ХТО, синтеза систем управления и т.п.

В общем случае флуктуации значений выходных параметров обусловлены двумя причинами: флуктуациями входных параметров (расходами фаз и их температурами, концентрациями веществ на входе в аппарат и т. д.) во времени и явлениями нерегулярной, хаотической природы в самом объекте, которые, как правило, сопровождают любой достаточно интенсивный процесс. Учет влияния этих явлений на флуктуации выходных параметров основывается на статистическом исследовании различных состояний макросистемы, моделирующей объект. Однако аналитические методы исследования функционирования таких объектов практически неприменимы, поскольку при учете случайных возмущений возникает необходимость решения в общем случае нелинейных уравнений, содержащих вероятностные характеристики анализируемых процессов. Поэтому для исследования функционирования ХТО, находящихся под действием случайных процессов, применяют методы имитационного статистического моделирования. В связи с этим становится актуальным разработка методов и алгоритмов моделирования входных случайных процессов.

В данной работе рассматривается моделирование входных случайных процессов, которые, как указывалось выше, вызывают флуктуации выходных параметров ХТО.

При этом определение вероятностных характеристик функционирования ХТО происходит вблизи стационарных состояний, которым соответствуют входные стационарные случайные процессы. Поэтому входные процессы можно представить в виде

$$\mathbf{X}_i(t) = \mathbf{X}_i^0 + \Delta\mathbf{X}_i(t), \qquad (i=1,2,\ldots), \tag{1}$$

где $\mathbf{X}_i^0 = \left[g_i^0, Q_{i1}^0, \ldots, Q_{iN_Q}^0, T_i^0\right]^T = \mathrm{const}$ - вектор-столбец детерминированных составляющих i-го входного процесса; $\Delta\mathbf{X}_i(t) = \left[\Delta g_i(t), \Delta Q_{i1}(t), \ldots, \Delta Q_{iN_Q}(t), \Delta T_i(t)\right]^T$ - вектор-столбец случайных составляющих i-го входного процесса с математическим ожиданием $M\Delta\mathbf{X}_i(t) = 0$ и корреляционной функцией

$R_i(t_1,t_2) = R_i(\tau) = M\Delta\mathbf{X}_i(t)\Delta\mathbf{X}_i^T(t+\tau)$; g_i - расход поступающего технологического потока (сырья, теплоносителя) в ХТО; T_i - температура потока; Q_{ij} - концентрации j-х веществ во входном потоке; t, τ – время; верхний индекс Т – символ транспонирования.

Случайные изменения параметров входных потоков обусловлены тем, что на входы ХТО действуют выходные случайные процессы внешних подсистем: подготовки сырья или основного производства. При этом выходные случайные процессы имеют гауссовские распределения [1], которые в общем случае являются коррелированными процессами. Если при исследовании ХТО его математическая модель включена в имитационную модель химико-технологической системы, то характеристики входных случайных процессов ХТО определяются при имитации системы. Если же моделирование ХТО производится автономно, то для получения наиболее неблагоприятных (пессимистических) оценок его функционирования необходимо моделировать некоррелированные входные процессы.

Известно, что

$$\sum_{j=1}^{N_Q} Q_{ij} = 1, \qquad (2)$$

где Q_{ij} - концентрация в массовых долях j-го вещества в i-м потоке.

Соответственно для изменений концентраций ΔQ_{ij} можем записать

$$\sum_{j=1}^{N_Q} \Delta Q_{ij} = 0 \qquad (3)$$

Таким образом, изменения расхода Δg_i, температуры ΔT_i и концентраций ΔQ_{ir} N_Q-1 веществ являются статистически независимыми между собой случайными величинами, т.е. всего N_Q+1 статистически независимых случайных величин во входном потоке.

Из формулы (3) следует, что изменение концентрации ΔQ_{iq} q-го вещества является линейной комбинацией концентраций ΔQ_{ij} j-х веществ. Выбор q-го вещества и вычисление изменения его концентрации ΔQ_{iq} осуществляется по формулам

$$Q^0_{iq} = \max\{Q^0_{i1},\ldots,Q^0_{iN_Q}\}, \qquad (4)$$

$$\Delta Q_{iq} = -\sum_{\substack{j=1\\ j\neq q}}^{N_Q} \Delta Q_{ij}\,. \qquad (5)$$

Выбор максимального значения концентрации Q^0_{iq} q-го вещества i-го потока обусловлен тем, что малые концентрации Q^0_{ij} j-х веществ стационарного процесса будут иметь соответственно и малые изменения концентраций ΔQ_{ij} (среднеквадратическая ошибка не более $0{,}1Q^0_{ij}$), следовательно, и очень мала вероятность невыполнения неравенства $0 \le Q_{iq}(t) \le 1$.

Моделирование марковского многомерного гауссовского процесса возможно с помощью приближенного метода формирующего фильтра [2]. Формирующий фильтр – динамическая система, преобразующая случайный гауссовский белый шум $\eta(t)$ в случайный гауссовский процесс $\xi(t)$ с заданными статистическими характеристиками: математическим ожиданием m_ξ, корреляционной функцией $R_\xi(\tau)$ или спектральной плотностью $S_\xi(\omega)$. В рассматриваемом случае моделируемыми процессами $\xi(t)$ являются соответствующие компоненты вектора $\Delta\mathbf{X}_i(t)$. Белый шум представляет собой стационарный случайный процесс с постоянной спектральной плотностью S_0. Его корреляционная функция

$$R_\eta(\tau) = 2\pi S_0 \delta(\tau), \qquad (6)$$

где $\delta(t)$ – дельта-функция Дирака, определяемая соотношениями:

$$\delta(\tau) = \begin{cases} \infty & \text{при} \quad \tau = 0; \\ 0 & \text{при} \quad \tau \neq 0; \end{cases} \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(\tau)d\tau = 1. \qquad (7)$$

Процесс $\eta(t)$ нормирован условием $S_0 = 1/2\pi$, $M\eta(t) = 0$.

Представим спектральную плотность процесса $\xi(t)$ в виде произведения двух комплексно сопряженных сомножителей $S_\xi(\omega) = S(i\omega)S(-i\omega)$ и запишем передаточную функцию устойчивого формирующего фильтра для процесса $\xi(t)$ [2]

$$W(p) = \frac{S(p)}{\sqrt{S_0}}. \qquad (8)$$

Для дробно-рациональной спектральной плотности $S_\xi(\omega)$ передаточная функция $W(p)$ имеет вид

$$W(p) = \frac{1}{\sqrt{S_0}} \frac{F_m(p)}{H_n(p)}, \qquad (9)$$

где $F_m(p)$, $H_n(p)$ - полиномы степени m, n, m<n; p – комплексная переменная. Передаточной функции $W(p)$ соответствует дифференциальное уравнение, записанное в операторной форме,

$$H_n(D)\xi(t) = \frac{1}{\sqrt{S_0}} F_m(D)\eta(t), D = d/dt \quad (10)$$

Уравнение формирующего фильтра для имитационной модели, синтезированной на основе принципа «Δt» [3], получается из формулы (10) при $S_0 = \Delta t/2\pi$ и имеет вид

$$H_n(D)\xi(t) = \sqrt{\frac{2\pi}{\Delta t}} \cdot F_m(D)\varepsilon_{\Delta t}(t), \quad (11)$$

где $\varepsilon_{\Delta t}(t) = \varepsilon_k$, $t \in [k\Delta t, \ (k+1)\Delta t]$ - ступенчатый процесс с шагом Δt, порождаемый дискретным гауссовским белым шумом $\varepsilon_k \sim N(0,1)$, моделируемым на цифровой ЭВМ (k=0, 1, 2,…), ε_k - некоррелированы.

Уравнение формирующего фильтра (11) можно представить в виде системы дифференциальных уравнений первого порядка

$$\frac{d}{dt}\mathbf{Z}(t) = A\mathbf{Z}(t) + \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} B\varepsilon_{\Delta t}(t), \quad (12)$$

где $\mathbf{Z}(t) = [z_1(t), \ldots, z_n(t)]^T$ - n – мерный гауссовский марковский процесс, первая компонента которого представляет собой моделируемый стационарный случайный процесс $\xi(t)$.

Если $\sqrt{2\pi} \cdot F_m(p) = \beta_0 p^m + \beta_1 p^{m-1} + \ldots + \beta_m$, $H_n(p) = p^n + \alpha_1 p^{n-1} + \ldots + \alpha_n$, то матрица A и вектор B равны [2]

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ldots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 \\ \alpha_n & \alpha_{n-1} & \alpha_{n-2} & \ldots & \alpha_1 \end{bmatrix}, \qquad B = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ b_{n-m} \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{bmatrix} \qquad (13)$$

$$\text{и } b_{n-m} = \beta_0, \quad b_k = \beta_{k-(n-m)} - \sum_{j=1}^{k-(n-m)} \alpha_j b_{k-j}, \quad k = n-m+1, \ldots, n. \qquad (14)$$

Решение уравнения (12) для момента времени $t + \Delta t$ имеет вид

$$\mathbf{Z}(t+\Delta t) = e^{A\Delta t}\left[e^{At}\mathbf{Z}(t_0) + \int_{t_0}^{t} e^{A(t-\tau)} \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} B\varepsilon_{\Delta t}(\tau)d\tau\right] + \int_{t}^{t+\Delta t} e^{A(t+\Delta t-\tau)} \frac{1}{\sqrt{\Delta t}} B\varepsilon_{\Delta t}(\tau)d\tau. \qquad (15)$$

Соотношению (15) соответствует рекуррентное уравнение

$$\mathbf{Z}_{k+1} = \Phi(\Delta t)\mathbf{Z}_k + \mathbf{v}_{k+1}, \qquad k=0, 1, 2,\ldots, \qquad (16)$$

где $\mathbf{Z}_k = \mathbf{Z}(k\Delta t)$; $\qquad \Phi(\Delta t) = e^{A\Delta t}$; $\qquad$ (17)

$\mathbf{v}_{k+1}$ - гауссовский случайный вектор с характеристиками

$$M\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{0}, \quad M\mathbf{v}_k\mathbf{v}_r^T = \mathbf{0} \quad \text{при } k \neq r, \qquad (18)$$

$$R_{\mathbf{v}}(\Delta t) = M\mathbf{v}_{k+1}\mathbf{v}_{k+1}^T = \int_0^{\Delta t} e^{A\tau}\frac{1}{\sqrt{\Delta t}}BB^T\frac{1}{\sqrt{\Delta t}}e^{A^T\tau}d\tau. \quad (19)$$

Векторы $\mathbf{v}_{k+1}$ не зависят от векторов $\mathbf{Z}_k$

Для установившегося стационарного процесса $\frac{d}{d\Delta t}R_{\mathbf{v}}(\Delta t) = 0$, и корреляционная матрица $R_{\mathbf{v}}(\Delta t)$ определяется из уравнения

$$AR_{\mathbf{v}}(\Delta t) + R_{\mathbf{v}}(\Delta t)A^T + B_1B_1^T = 0, \qquad B_1 = \frac{1}{\sqrt{\Delta t}}B. \quad (20)$$

Симметрическая неотрицательно определенная матрица $R_{\mathbf{v}}(\Delta t)$ может быть представлена в виде [4]

$$R_{\mathbf{v}} = \Gamma\Gamma^T, \quad (21)$$

где Γ – нижняя треугольная матрица.

Из уравнений (16) и (21) получаем дискретное уравнение для моделирования случайного процесса

$$\mathbf{Z}_{k+1} = \Phi(\Delta t)\mathbf{Z}_k + \Gamma\varepsilon_{k+1}, \qquad k=0, 1, 2,\ldots, \quad (22)$$

Таким образом, моделирование входных случайных процессов ХТО происходит по следующему алгоритму:

1. В начальный момент времени $t_0 = 0$ из множества концентраций $\{Q_{ij}^0\}$ компонент вектора $\mathbf{X}_i^0$ (i=1, 2, …,N_X; j=1, 2,…,N_Q) каждого входного потока по формуле (4) выбираются $\max Q_{iq}^0$;
2. С помощью датчика нормально распределенных чисел моделируется значение дискретного гауссовского шума ε_k при k = 0 и устанавливаются начальные значения компонент векторов $\Delta\mathbf{X}_i(t_k)$. Значения $\Delta Q_{iq}(t_0)$ выбранных $\max Q_{iq}^0$ концентраций веществ определяются по формуле (5);
3. По уравнениям (17), (20), (21) рассчитываются экспоненциальная $\Phi_{ij}(\Delta t)$ и треугольная Γ_{ij} матрицы для каждого j-го компонента вектора $\Delta\mathbf{X}_i(t_k)$ (j≠q) i-го потока;
4. С помощью датчика нормально распределенных чисел моделируются значения дискретного гауссовского шума ε_k (k=1, 2, …). По уравнению (22) осуществляется расчет векторов $\mathbf{Z}_{k+1}$ для всех j-х компонент векторов $\Delta\mathbf{X}_i(t_{k+1})$ за исключением компоненты ΔQ_{iq}, расчет которой производится по формуле (5). Первая компонента вектора $\mathbf{Z}_{k+1}$ представляет собой моделируемое значение процесса $\Delta x_{ij}(t_{k+1})$;
5. Если при моделировании концентраций $\Delta Q_{ij}(t_k)$ реализуются значения $Q_{ij}(t_k) \notin [0,\ 1]$, то моделируются новые значения $\Delta Q_{ij}(t_k)$ и расчет концентраций осуществляется по формулам (2), (3) так, чтобы выполнялось условие $Q_{ij}(t) \in [0,\ 1]$.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Протодьяконов И.О., Богданов С.Р. Статистическая теория явлений переноса в процессах химической технологии. Л.: Химия, 1983, 400 с.
2. Шалыгин А.С., Палагин Ю.И. Прикладные методы статистического моделирования. Л.: Машиностроение, 1986, 320 с.
3. Бусленко Н.П. Моделирование сложных систем. М.: Наука, 1978, 400 с.
4. Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М.: Наука, 1967, 576 с.