



УДК 66.01.011:66.01.052:62.503.56:519.863.517.9:518.12

Ф.Г. Ахмадиев

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ И РЕШЕНИЕ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ИХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

Успех в разработке и внедрении в промышленную практику принципиально новых технологических процессов, новых высокоэффективных аппаратов, интенсификация работы существующих, создание новых материалов с заданными свойствами и т.д. возможны только при наличии современных точных и надежных методов расчета технологических процессов.

Большинство технологических процессов осуществляются в гетерогенных средах. Это такие процессы, как течение многофазных сред в рабочих элементах и узлах машин и аппаратов, смешение сыпучих материалов с различными жидкостями, диспергирование, коалесценция и дробление, измельчение, тепломассообменные процессы в многофазных средах, разделение гетерогенных сред по различным признакам, гетерофазные химические реакции; процессы нефтедобычи, нефтеподготовки и переработки и т.п. Они являются одними из широко распространенных и составляют основу многих технологических процессов.

Существенной особенностью технологических процессов в гетерогенных средах является то, что они имеют двойственную детерминированно-стохастическую природу, сложное реологическое состояние, они осложнены эффектами межфазного взаимодействия, полидисперсностью, дроблением и коалесценцией фаз, нелинейными явлениями и т.д. Поэтому при построении современных методов расчета технологических процессов должны быть привлечены методы механики гетерогенных сред, фундаментальные законы статистической физики и термодинамики необратимых процессов, современные математические методы (теория перколяций и фракталов и т.д.). При этом согласно принципам системного анализа процессы построения методов расчета, принятия решения, оптимального проектирования должны носить многоэтапный характер. Сначала используются упрощенные модели (быстрые алгоритмы) и в дальнейшем применяются поверочные расчеты на основе полной модели, а также, при необходимости, буферные расчеты.

В соответствии с этими положениями, в данной статье приводятся результаты анализов следующих проблем, которые выполнены на кафедре прикладной математики КГАСУ.

I. ТЕРМОГИДРОМЕХАНИКА МНОГОФАЗНЫХ И РЕОЛОГИЧЕСКИ СЛОЖНЫХ СРЕД И ИХ ПРИЛОЖЕНИЯ

Процессы в многофазных средах описываются системой дифференциальных уравнений сохранения термогидромеханики многофазных сред с соответствующими замыкающими соотношениями [1]. Нами предложена единая методика упрощения и решения уравнений механики многофазных сред для различных классов течений. Были рассмотрены их приложения к важнейшим процессам химической технологии, оптимальное аппаратное оформление. При этом были проанализированы:

1.1. Различные течения гетерогенных сред в областях сложной геометрии, которые являются рабочими элементами, узлами машин и аппаратов [2,3].

1.2. Тепломассообмен при двухфазных пленочных течениях по обогреваемым поверхностям [4,5].

1.3. Центробежные диспергаторы (механические и на воздушной подушке).

1.4. Центробежные смесители для получения высоконаполненных смесей (до 50÷80%) тонкодисперсных материалов на основе полимерных жидкостей [6].

1.5. Тепломассообменные аппараты с регулируемым временем пребывания материалов; переработка тяжелых пиролизных смол отходов производства этилена из углеродного сырья (Э-100-200), вихревые контактные устройства [7,8,9,10].

1.6. Центробежные сепараторы, центробежные сгустители [11].

1.7. Классификаторы зернистых материалов по различным признакам, в частности, по удельному весу и по размерам [12,13,14].

1.8. Барабанные вакуум-фильтры, фильтрующие и осадительные центрифуги; пленочные и трубчатые фильтровальные аппараты; фильтрование проницаемыми (пористыми) поверхностями [3,15,16,17,18,22-24].

1.9. Проблемы нефтеподготовки (эмульгирование, разделение эмульсий, утилизация водной эмульсии нефти, с использованием центрифуги, фильтрования через пористые материалы) и повышения эффективности нефтедобычи [17].

1.10. Процессы загрязнения подземных вод (экологические проблемы).



В этой области имеются проблемы замыкания уравнений сохранения для реологически сложных сред, турбулентных течений, а также построения эффективных расчетных схем.

II. ПРОЦЕССЫ ПЕРЕРАБОТКИ ДИСПЕРСНЫХ МАТЕРИАЛОВ И ТЕПЛОМАССОБМЕНА В ГЕТЕРОГЕННЫХ СИСТЕМАХ ПРИ НАЛИЧИИ ФЛУКТУАЦИЙ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ

Рассмотрены процессы моделирования, оптимальной организации соответствующих процессов и аппаратурного оформления и практического использования результатов исследования; в частности, на основе теории марковских процессов:

2.1. Процессы смешения при различных режимах их организации; смесительные комплексы: дозатор-смеситель; усреднение свойств больших партий зернистых материалов; смеситель на магнитной подушке [19].

2.2. Измельчение сыпучих материалов.

2.3. Процессы эмульгирования: способ получения тонкодисперсных эмульсий раствора полимера (с размерами в диапазоне $5 \div 50$ мкм; $d_{cp} \approx 27$ мкм), получение стержневых и формовочных смесей (стержневая смесь СС-5: песок + крепитель 4ГУ В + концентрат сульфитно-спиртовой барды (КБЖ) + асбестовая крошка + вода) [20].

2.4. Тепломассообмен в различных двухфазных системах с учетом флуктуаций физико-химических параметров: например, сушка гранулированных полимерных материалов (95% материалов удовлетворяет технологическим требованиям) [21], растворение.

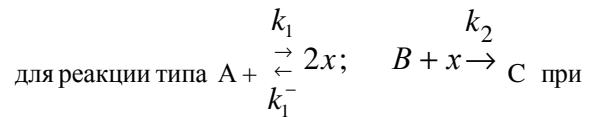
2.5. Создание новых материалов [33,34].

III. ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ ДИССИПАТИВНЫХ СТРУКТУР, РАЗЛИЧНЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ ЭФФЕКТОВ (ДЕТЕРМИНИРОВАННЫЙ ХАОС) ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИМ ПРОЦЕССАМ

Подобные исследования очень важны для химических систем с каталитическими механизмами, для гетерофазных реакций, кристаллизации и процессов в псевдооживленных системах; при переходе к турбулентным режимам, при получении многофункциональных материалов (материаловедение).

3.1. Химические реакции при флуктуации констант скорости реакции и концентраций (шумы). При этом по кинетическим уравнениям химических реакций можно при определенных условиях построить

уравнение Колмогорова-Фоккера-Планка (К-Ф-П). Например,



условии, что концентрации веществ А и В поддерживаются постоянными, а вещество С непрерывно выводится из системы, концентрация вещества x подчиняется уравнению

$$\frac{dx}{dt} = k_1 Ax - k_1^- x^2 - k_2 Bx \quad (3.1)$$

Тогда уравнение (К-Ф-П) имеет вид:

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x} \left[(k_1 Ax - k_1^- x^2 - k_2 Bx) P(x,t) \right] + \frac{1}{2} S \frac{\partial^2 P(x,t)}{\partial x^2} \quad (3.2)$$

В этой области реакции типа Белоусова-Жаботинского являются наиболее изученными из колебательных химических реакций.

3.2. Кристаллизация малорастворимых веществ (МРВ): выявлены условия проведения процессов кристаллизации МРВ, приводящие к потере устойчивости режима и возникновению диссипативных структур в виде автоколебаний концентрации, скорости роста кристаллов и образования колец Лизеганга.

По уравнениям изменения концентрации раствора и за счет образования ультрамикрорекристаллов при различных способах создания пересыщения можно, переходя к дискретным аналогам, в частном случае, получить

$$x_{j+1} = mx_j (1 - x_j) - \text{уравнение типа Фейгенбаума,}$$

где $x_j = \Delta C_j + D$, Δt - время образования ультрамикрорекристалла. При определенных значениях параметра m наступает полный хаос (пульсационные режимы).

Физические причины возникновения флуктуации скорости роста кристаллов: дискретность процесса кристаллизации в виде дискретного времени образования ультрамикрорекристаллов, скорость создания пересыщения и существование обратных связей в механике образования МРВ.

3.3. Автоколебательные режимы химических реакций (исследование неустойчивых предельных циклов с фазовой траекторией, соответствующей странному аттрактору).



IV. НОВЫЕ ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ ОПТИМАЛЬНОГО ПРОЕКТИРОВАНИЯ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Разрабатывается компьютерная технология оптимального проектирования химико-технологических систем [29-31], схема которой может быть представлена в следующем виде:

Интеллектуальный интерфейс + база знаний + решатель + ППП . (4.1)

Математическая модель проектирования как отдельного процесса (аппарата), так и технологической схемы в целом является общей и, как правило, представляет собой задачу многокритериальной оптимизации с заданным набором целевых функций $\bar{F}(\bar{z})$, определяющих требования проектировщика к создаваемому объекту, и вектором ограничений двух типов: а) ограничений типа равенств $\bar{Y}(\bar{z}) = 0$, соответствующих полной математической модели проектируемого объекта; б) ограничений типа неравенств $\bar{z}_{\min} \leq \bar{z} \leq \bar{z}_{\max}$, соответствующих физической осуществимости объекта и техническому заданию на объект проектирования .

Математически задача оптимального проектирования может быть представлена в виде:

найти $\max(\min) \bar{F}(\bar{x}, \bar{y}, \bar{T}, \bar{K}, \bar{H}, \bar{M})$, при условиях (4.2)

$$\begin{cases} \bar{Y}(\bar{z}) = \bar{Y}(\bar{x}, \bar{y}, \bar{T}, \bar{K}, \bar{H}, \bar{M}) = 0 \\ \bar{z}_{\min} \leq \bar{z} \leq \bar{z}_{\max} \end{cases} . \quad (4.3)$$

Здесь $\bar{F} = \bar{F}(f_1, f_2, \dots, f_n)$ - набор целевых функций; $\bar{Y} = \bar{Y}(Y_1, Y_2, \dots, Y_k)$ - вектор-функция функционального оператора объекта, т.е. система уравнений его математической модели; \bar{z} - вектор варьируемых переменных, ограниченных сверху и снизу. Исходя из условий физической, технологической и конструктивной осуществимости технической системы и технического задания; \bar{x}, \bar{y} - вектора входных и выходных потоков; \bar{T} - вектор оператора технического воздействия на обрабатываемую среду; \bar{K} - вектор конструктивных особенностей объекта; \bar{H} - вектор ограничений на конструкцию; \bar{M} - вектор требований технического задания.

Важнейшей составной частью математической модели (4.2) (4.3) является модель проектируемого объекта $\bar{Y}(\bar{z}) = 0$. Построение этой модели

$\bar{Y}(\bar{z}) = 0$ является самым важным и сложным моментом при решении задачи (4.2)-(4.3), следовательно, и для реализации схемы оптимального проектирования технологических процессов (4.1). Для построения модели (4.2) - (4.3), следовательно, математической модели $\bar{Y}(\bar{z}) = 0$, привлекаются современные методы механики сплошных сред, математики, фундаментальные законы статистической физики и термодинамики необратимых процессов, современные средства вычислительной техники и программного обеспечения.

4.1. Примеры:

а) Оптимизация процесса разделения зернистых материалов по размерам на многокаскадных классификаторах.

б) Оптимизация работы барабанного вакуум-фильтра со сходящей рабочей лентой.

4.2. Анतिकоррозионная защита различных конструкций и разработка САПР противокоррозионной защиты [32,35].

4.3. Создание базы данных по экологическому контролю химических, нефтехимических промышленных предприятий и прогнозированию экологической ситуации.

4.4. Разработка пакета прикладных программ и программных комплексов.

Разработаны ППП и программные комплексы (методы и программное обеспечение) для однокритериальной и многокритериальной оптимизации и оптимального аппаратурного оформления соответствующих процессов, аппаратов и управления ими.

В частности, эффективные методы: "У" - преобразования, статические и динамические задачи многокритериальной оптимизации и управления.

V. ИССЛЕДОВАНИЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ, ИНТЕГРАЛЬНЫХ И ИНТЕГРО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ

При математическом моделировании технологических процессов и аппаратов возникают задачи решения систем дифференциальных и интегральных уравнений. В связи с этим на кафедре ПМ кроме решения краевых задач математических моделей вышеперечисленных процессов проводятся исследования по следующим направлениям:

5.1. Решение краевых задач для уравнений смешанного типа [25,26].

5.2. Исследование сходимости устойчивости метода осциллирующих функций для интегральных и интегрально-дифференциальных уравнений [27, 28].



ЛИТЕРАТУРА

1. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред - М.: Наука, 1987, т.1. - 464 с.
2. Ахмадиев Ф.Г., Дорохов И.Н., Кафаров В.В. Новые методы расчета конкретных гидромеханических процессов химической технологии с использованием уравнений механики гетерогенных сред // Доклад АН СССР, М., 1984, т.274, №4.
3. Ахмадиев Ф.Г., Ибяттов Р.И.. Гидродинамика пленки жидкости на поверхности движущегося пористого тела // ТОХТ, т. XXXII, №2, 1998.
4. Ахмадиев Ф.Г., Гильфанов Р.М.. Расчет конвекции при пленочном течении двухфазной эмульсии по обогреваемым поверхностям // Межвуз. сб.: Теплообмен в хим. технологии, Казань: КХТИ, 1989.
5. Ахмадиев Ф.Г., Ибяттов Р.И., Фазылзянов Р.Р.. Неизотермические течения гетерогенных сред по поверхностям вращающегося пронцаемого ротора // Труды IV Минского международного форума Теплообмен МФ-2000, т.11, Минск, 2000. - С.24-27.
6. Александровский А.А., Ахмадиев Ф.Г., Ибяттов Р.И.. Расчет тонкослойного течения двухфазных сред по поверхности центробежных смесителей с учетом реологических факторов // Инженерно-физический журнал, 1984, т.47, №6.
7. Шамсутдинов А.М., Зиннатов В.Г., Ахмадиев Ф.Г. и др. Выбор оптимальной геометрии вихревых устройств для газожидкостных теплообменных процессов // Изв. вузов: Серия химия и химическая технология, т.34. - Иваново, 1991.
8. Шамсутдинов А.М., Зиннатов В.Г., Ахмадиев Ф.Г. и др. Массоотдача в жидкой фазе в вихревых устройствах // Известия вузов: Серия химия и химическая технология. т.34. - Иваново, 1991.
9. Ахмадиев Ф.Г., Гильфанов Р.М.. Математическое моделирование процесса сложного теплообмена в слоевом реакторе // Сборник докладов 3-го Минского между. Форума по теплообмену, т.11. - Минск, 1996.
10. Ахмадиев Ф.Г., Холпанов Л.П., Гильфанов Р.М. Численное моделирование нелинейного теплообмена при пленочном течении // II Междун. научн. конф. Математические методы в химии и технологиях, т.1. - Владимир, 1998.
11. Ахмадиев Ф.Г., Дорохов И.Н., Кафаров В.В., Пушкин А.А., Перов А.В. Новый метод расчета центробежных аппаратов // Докл. АН СССР, М., 1984, т. ССLXXIV, N5.
12. Ахмадиев Ф.Г., Журавлева Г.П. Моделирование процесса разделения семян хлопчатника по удельному весу в аппаратах с псевдооживленным слоем // Ташкент, Докл. АН УзССР, 1984, №7.
13. Ахмадиев Ф.Г., Киямов Х.Г., Гиззятов Р.Ф. Математическое моделирование процессов классификации зернистых материалов на многоярусных ситовых классификаторах // Химическое и нефтяное машиностроение, №2, М., 1992.
14. Ахмадиев Ф.Г., Гиззятов Р.Ф. Modelling of grainy materials division processes on multilayer classifiers // XII Международный конгресс по химической технологии, CHISA-96, Прага, 1996.
15. Ахмадиев Ф.Г., Ибяттов Р.И. Гидродинамика пленки жидкости на поверхности движущегося пористого тела // ТОХТ, т. XXXII, №1, М., 1998.
16. Ахмадиев Ф.Г., Ибяттов Р.И. Расчет фильтрационного разделения суспензий на пронцаемой поверхности произвольной формы // Сборник научных трудов междунар. конф. Теория и практика фильтрования. - Иваново, 1998.
17. Ахмадиев Ф.Г., Ибяттов Р.И., Киямов Х.Г. Математическое моделирование процесса разделения суспензии в барабанном вакуум-фильтре со сходящей рабочей лентой // ТОХТ, т. XXXII, №2, М., 1998.
18. Ахмадиев Ф.Г., Александровский А.А., Островская Э.Н. Исследование кинетики процесса эмульгирования // Журнал прикладной химии. М., 1984, т.57, №1.
19. Ахмадиев Ф.Г., Александровский А.А.. Моделирование и реализация способов приготовления смесей // Журнал всеобщ. хим. общества им. Д.И. Менделеева, М., 1988, №4.
20. Ахмадиев Ф.Г., Александровский А.А., Островская Э.Н.. Исследование кинетики процесса эмульгирования // Журнал прикладной химии. М., 1984, т.57, №1.
21. Ахмадиев Ф.Г., Александровский А.А., Дорохов И.Н. О моделировании процесса массообмена с учетом флуктуаций физико-хим. параметров // Инж.-физ. журнал, т. XLIII: М., 1982, №2.
22. Холпанов Л.П., Ибяттов Р.И., Ахмадиев Ф.Г., Фазылзянов Р.Р. Математическое моделирование гидродинамики на пронцаемых поверхностях // ТОХТ. 2003, т.37, №3. - С.227-237.
23. Ибяттов Р.И., Холпанов Л.П., Ахмадиев Ф.Г., Фазылзянов Р.Р. Математическое моделирование течений гетерогенных сред по вращающимся пронцаемым поверхностям // ТОХТ. М., 2003, т.37, №5. - С.479-492.
24. Ибяттов Р.И., Холпанов Л.П., Ахмадиев Ф. Г., Фазылзянов Р.Р. Расчет течения гетерогенных сред неньютоновского поведения по пронцаемым поверхностям // Инженерно-физический журнал. М., 2003, т.76, №6. - С. 80-87.
25. Хайруллин Р.С. О задаче Трикоми для уравнения второго рода в случае первой четверти // Сб. трудов математического центра им. Н.И.Лобачевского, т.25, №8. Казань, 2004.
26. Аглямзянова Г.Н., Хайруллин Р.С. Задача Трикоми в классе функций, неограниченных на характеристике // Известия вузов. Математика. Казань, 2004.
27. Ермолаева Л.Б. Решение интегральных уравнений методом подобластей // Известия вузов. Математика.



- №9, Казань, 2002.
28. Ермолаева Л.Б. Решение периодических краевых задач методом подобластей //Известия ВУЗов. Математика, №8. Казань, 2004.
29. Ахмадиев Ф.Г., Габбасов Ф.Г., Ибяттов Р.И., Гильфанов Р.М., Киямов Х.Г., Гиззятов Р.Ф., Зиннатов В.Г., Шафигуллина С.К. Информационные технологии оптимального проектирования химико-технологических процессов. Этап 2001 г. Разработка базы математических моделей процессов переработки гетерогенных сред и алгоритмов решения полученных задач. Конкурс проектов 2001 г., отчеты АНРТ. Казань, 2003.
30. Ахмадиев Ф.Г., Ибяттов Р.И., Габбасов Ф.Г., Гиззятов Р.Ф., Гильфанов Р.М., Киямов Х.Г. Новые информационные технологии оптимального проектирования процессов и аппаратов химической промышленности Фонд НИОКР РТ. Фундаментальные науки. Конкурс проектов 1997г. Отчеты. Научное издание. Казань: ФизтехПресс, 2002. - С.4.
31. Ахмадиев Ф.Г., Ибяттов Р.И., Габбасов Ф.Г., Гиззятов Р.Ф., Гильфанов Р.М., Зиннатов В.Г., Киямов Х.Г. Информационные технологии оптимального проектирования технологических процессов нефтехимии Фонд НИОКР РТ. Фундаментальные науки. Курсы проектов 98/99. Отчеты, ч.2. Научное издание. - Казань: ФизтехПресс, 2002. - С. 4.
32. Якупов Н.М., Гатауллин И.Н., Хисматуллин Р.Н. Обследование, анализ и прогнозирование долговечности строительных конструкций и рекомендации по их восстановлению. Методическое руководство. Казань: ИММ РАН, 1996. -208 с.
33. Porfiryeva R.T., Akhmetov T.G., Akhmadiev F.G., Gabbasov F.G. и др. Aggressive Environment Resistant Sulfur Containing Construction Material. Third European Congress of Chemical Engineering ECCE-3, Chemie Ingenieur Technik, g. Weinheim, №6, 2001, 1 с.
34. Porfiryeva R.T., Gerasimov V.V., Gabbasov F.G., Akhmadiev F.G. Surface modification of silicacontaining materials. 15 th International Congress of Chemical and Engineering. CHISA. Чехия. Прага. Полный текст в CD CHISA-2002.
35. Ахмадиев Ф.Г., Гатауллин И.Н., Киямов Х.Г., Якупов Н.М. Прогнозирование напряженно-деформированного состояния градирни // Известия КГАСУ, №1. Казань, 2003.