

Член-корреспондент АН СССР В. В. КАФАРОВ, В. Л. ПЕРОВ,
В. А. ИВАНОВ, Д. А. БОБРОВ, В. В. СУЗДАЛЕВИЧ

ПРИНЦИП АГРЕГИРОВАНИЯ ПРИ РАСЧЕТЕ ХИМИКО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Большинство методов расчета и оптимизации химико-технологических систем (ХТС) основано на последовательном расчете математических моделей отдельных элементов системы с применением той или иной стратегии решения задачи. Однако ввиду сложности математических моделей отдельных процессов, требующих большого объема вычислений, их не всегда целесообразно использовать независимо друг от друга (1).

Нами предлагается принцип агрегирования элементов ХТС при ее расчете и оптимизации, заключающейся в объединении математических моделей группы элементов в одну модель, которая и используется непосредственно при решении поставленной задачи. Формализация принципа агрегирования осуществляется с помощью описания ХТС топологической моделью в виде информационно-потокowego мультиграфа (и.п.м.г.) (2). Рассмотрим применение принципа агрегирования при описании элементов ХТС с помощью операторных математических моделей, которые получаются на основе статистических испытаний математических моделей, учитывающих кинетику, гидродинамику и термодинамику (3).

Введем некоторые характеристики для вершин и.п.м.г., отражающие информационные свойства операторов связи, соответствующих данным вершинам.

1. Входная степень связности i -й вершины и.п.м.г. (r_i) определяется количеством дуг, инцидентных данной вершине и направленных в нее ($r_i=1, r_i=3$, рис. 1).

2. Выходная степень связности i -й вершины (R_i) определяется количеством дуг, инцидентных i -й вершине и направленных из нее ($R_i=4, R_i=1$, рис. 1).

3. Попарная степень связности i -й вершины с j -й вершиной и.п.м.г. (y_{ij}) определяется количеством дуг, инцидентных этим вершинам и направленных из i -й в j -ю вершину (на рис. 1 попарная степень связности вершин i и 1 $y_{i,1}=3$, а $y_{1,i}=0$).

В дальнейшем полагаем, что для построения операторной модели элементов ХТС требуется полный факторный эксперимент, тогда время, необходимое для построения операторной модели вершины i будет $D_i=d_i 2^{r_i}$, а $i-1$ -й вершины $D_{i-1}=d_{i-1} 2^{r_{i-1}}$, где d_i, d_{i-1} — время расчета математических моделей i -й и $i-1$ -й вершины соответственно, S_i, S_{i-1} — количество оптимизирующих информационных переменных.

Очевидно, что $R_{i-1}=y_{i-1,i}$, $r_i=y_{i-1,i}+S_i$ (рис. 1). Общее время, затрачиваемое на построение операторов связи для каждой вершины отдельно, равно:

$$F_i=D_{i-1}+D_i=d_{i-1} 2^{r_{i-1}}+d_i 2^{r_i}. \quad (1)$$

Рассмотрим возможность построения операторной модели для обеих вершин одновременно, тогда происходит агрегирование вершины i и $i-1$ в одну вершину и.п.м.г.

Время, необходимое для построения общего оператора связи, в этом случае будет

$$F_2 = d_{i-1} 2^{r_{i-1}} + d_i 2^{r_{i-1} + s_i}. \quad (2)$$

Теорема 1. Если степень выходной связности вершины и.п.м.г. не меньше степени входной связности, то необходимо провести агрегацию ее с последующей вершиной.

Рассмотрим разность $\Delta F = F_2 - F_1$. Если $\Delta F > 0$, то $F_2 > F_1$ и агрегацию производить не следует, если $\Delta F \leq 0$, то для обеих вершин предпочтительно строить общую операторную модель.

Представим в ΔF значения F_1 и F_2 , тогда

$$\Delta F = d_i (1 - 2^{R_{i-1} - r_{i-1}}). \quad (3)$$

Из формулы (3) видно, что при $R_{i-1} \geq r_{i-1}$ $\Delta F \leq 0$ и, следовательно, время, затрачиваемое на построение совместного оператора связи, меньше

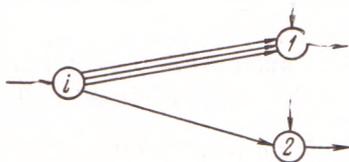


Рис. 1



Рис. 2

или равно времени построения двух операторов для каждой вершины отдельно. Равенство нулю включается в условие агрегации, так как сокращается количество уравнений, описывающих ХТС, что имеет очевидную выгоду при ее оптимизации.

Для случая, когда i -я вершина и.п.м.г. связана попарно с N вершинами одновременно (рис. 1, $N=2$) может быть сформулирована следующая

Теорема 2. Если попарная степень связности данной i -й вершины не меньше входной степени связности рассматриваемой вершины, то ее следует объединить с той вершиной, для которой ΔF меньше.

Проводя рассуждения, аналогичные изложенным выше, можно записать следующие условия:

$$\Delta F_j = d_j (1 - 2^{y_{ij} - r_i}), \quad (4)$$

где ΔF_j — разность времени построения совместных и отдельных операторных моделей для i -й и j -й вершины, $j=1, 2, \dots, N$. Ясно, что при попарном рассмотрении вершин $\Delta F_j \leq 0$ только для тех вершин, для которых выполняется условие $y_{ij} \geq r_i$, причем, чем меньше ΔF_j , тем выгоднее производить агрегацию.

Для вершин с одинаковым временем расчета, очевидно, можно установить, что агрегацию данной вершины следует производить с той вершиной, для которой степень попарной связности больше.

Алгоритм построения совместной операторной модели для системы, имеющей обратную связь (рис. 2), состоит в том, что разрывается прямая или обратная связь между вершинами и.п.м.г. и для каждого входного состояния с помощью итераций по разорванным дугам достигается совпадение значений в местах разрыва.

В нашем случае возможны 2 варианта разрыва: 1) по дугам, направленным из $i-1$ -й вершины в i -ю (разрыв по $y_{i-1, i}$), и 2) по дугам, направленным из i -й вершины в $i-1$ -ю (разрыв по $y_{i, i-1}$). Время построения операторной модели при разрыве по $y_{i-1, i}$ будет равно:

$$F_{i-1, i} = 2^{r_i - y_{i-1, i}} N_i (d_i + d_{i-1} 2^{r_{i-1} - y_{i, i-1}}). \quad (5)$$

Аналогично при разрыве по $y_{i, i-1}$

$$F_{i, i-1} = 2^{r_{i-1}-y_{i, i-1}} N_2 (d_{i-1} + d_i 2^{r_{i-1}-y_{i, i-1}}), \quad (6)$$

где N_1, N_2 — количество итераций по $y_{i-1, i}$ и $y_{i, i-1}$ соответственно.

Для оценки наилучшего варианта разрыва рассмотрим разность

$$\Delta F_1 = F_{i-1, i} - F_{i, i-1} = d_i (N_1 2^{r_{i-1}-y_{i-1, i}} - N_2 2^{r_{i-1}+r_{i-1}-y_{i-1, i}-y_{i, i-1}}) + \\ + d_{i-1} (N_1 2^{r_{i-1}+r_{i-1}-y_{i-1, i}-y_{i, i-1}} - N_2 2^{r_{i-1}-y_{i, i-1}}). \quad (7)$$

Если $\Delta F_1 < 0$, то разрыв следует производить по $y_{i-1, i}$, если $\Delta F_1 > 0$, то разрыв необходимо проводить по $y_{i, i-1}$.

Предположим, что число итераций не зависит от места разрыва и количества разрываемых переменных и что время расчета вершин одинаково, тогда $N_1 = N_2$ и $d_{i-1} = d_i$.

В этом случае ΔF_1 будет иметь вид:

$$\Delta F_1 = d_i N_i (2^{r_{i-1}-y_{i-1, i}} - 2^{r_{i-1}-y_{i, i-1}}). \quad (8)$$

Из выражения (8) видно, что $\Delta F_1 < 0$ при $r_{i-1} - y_{i, i-1} > r_{i-1} - y_{i-1, i}$ и в этом случае разрыв следует проводить по $y_{i-1, i}$. Также $\Delta F_1 > 0$, если $r_{i-1} - y_{i, i-1} < r_{i-1} - y_{i-1, i}$, следовательно, с учетом принятых допущений можно сформулировать теорему.

Теорема 3. *Разрыв рецикла необходимо производить перед вершиной, имеющей наименьшее количество оптимизирующих информационных переменных.*

Пусть в выражении (7) $\Delta F_1 < 0$ и, следовательно, разрыв надо производить по $y_{i-1, i}$, тогда для оценки необходимости агрегации надо рассмотреть разность

$$\Delta F_2 = F_{i-1, i} - F_1 = \\ = d_{i-1} (N_1 2^{r_{i-1}+r_{i-1}-y_{i-1, i}-y_{i, i-1}} - 2^{r_{i-1}}) + d_i (N_1 2^{r_{i-1}-y_{i-1, i}} - 2^{r_i}). \quad (9)$$

Если $\Delta F_2 \leq 0$, то следует строить общую операторную модель; если $\Delta F_2 > 0$, то агрегацию производить не нужно.

Полученные результаты позволяют путем последовательного применения правил агрегирования оптимальным образом организовать процедуру расчета ХТС произвольной структуры. Важной особенностью метода является возможность его формализации с применением ЭВМ.

Московский химико-технологический институт
им. Д. И. Менделеева

Поступило
18 IX 1973

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ D. J. Wilde, Chem. Eng. Progr., v. 61, № 3 (1965). ² В. В. Кафаров, В. Л. Перов и др., ДАН, т. 207, № 1 (1972). ³ В. В. Кафаров, В. Л. Перов и др., ДАН, т. 197, № 4 (1971).