

Компьютерное моделирование технологических процессов

Компьютерное моделирование – один из самых мощных инструментов познания, анализа и проектирования, которым располагают специалисты, ответственные за разработку и функционирование сложных химических, био- и пищевых технологий и производств. Идея компьютерного моделирования проста и в то же время интуитивно привлекательна. Она дает возможность инженеру (исследователю) экспериментировать с объектами в тех случаях, когда делать это на реальном объекте практически невозможно или нецелесообразно. Сущность методологии компьютерного моделирования состоит в замене исходного технологического объекта его «образом» - математической моделью – и в дальнейшем изучении модели с помощью реализуемых на компьютерах вычислительно-логических алгоритмов. Этот метод познания, конструирования, проектирования сочетает в себе достоинства как теории, так и эксперимента. Работа не с самим объектом (явлением, процессом), а с его моделью дает возможность относительно быстро и без существенных затрат исследовать его свойства и поведение в любых мыслимых ситуациях (преимущества теории). В то же время вычислительные (имитационные) эксперименты с моделями объектов позволяют подробно и глубоко изучать объекты в достаточной полноте, недоступной чисто теоретическим подходам (преимущества эксперимента) [1].

Современные промышленные объекты химической, био- и пищевой технологий состоят из большого количества взаимосвязанных подсистем, между которыми существуют отношения соподчиненности в виде 3-х уровневой иерархической структуры. Первый уровень образуют типовые процессы химической, био- и пищевой технологий с определенным аппаратным оформлением (механические, гидродинамические, тепловые, диффузионные, био- и химические процессы) и локальные системы автоматического управления ими. Основу второго уровня иерархии составляют производственные цеха и системы автоматизированного управления цехами. Цех представляет собой совокупность отдельных технологических процессов, аппаратов и систем автоматического контроля и управления ими. Третий, высший уровень иерархической структуры предприятия химической, био- и пищевой технологий – это системы организации и оперативного планирования и управления всем производством. На этом уровне возникают задачи ситуационного анализа и оптимального управления всем предприятием (совокупностью всех цехов).

Основу современного кибернетического подхода к решению задач химической, био- и пищевой технологий составляет системный анализ, в соответствии с которым задачи исследования, анализа и расчета отдельных технологических процессов, компьютерного моделирования и оптимизации сложных химических, био- и пищевых систем, оптимального проектирования технологических комплексов решаются тесной связи друг с другом, объединены общей стратегией и подчинены единой цели - созданию высокоэффективного производства [2].

Сущность системного анализа определяется его стратегией, в основе которой лежат общие принципы, применимые к решению любой системной задачи. К ним можно отнести четкую формулировку цели исследования, постановку задачи по достижению заданной цели и определение критерия эффективности решения задачи; разработку развернутой стратегии исследования с указанием основных этапов и направлений в решении задачи: последовательно-параллельное продвижение по всему комплексу взаимосвязанных этапов и возможных направлений; организацию последовательных приближений и повторных циклов исследований на отдельных этапах; принцип нисходящей иерархии анализа и восходящей иерархии синтеза при решении составных частных задач.

Центральным понятием системного анализа является понятие системы, т.е. объекта, взаимодействующего с внешней средой и обладающего сложным внутренним строением, большим числом составных частей и элементов. Элемент системы – самостоятельная и условно неделимая единица. Совокупность элементов и связей между ними образует структуру системы. Элементы взаимодействуют между собой и окружающей средой, иначе говоря, между ними существует материальная, энергетическая и информационная связь. Расчленение системы на подсистемы позволяет вскрыть иерархию структуры и рассматривать систему на разных уровнях ее детализации. Сложность системы определяется сложностью ее структуры, количеством элементов и связей, числом

уровней иерархии, объемом информации, циркулирующей в системе. Система характеризуется алгоритмом функционирования, направленным на достижение определенной цели.

Формализация системы осуществляется с помощью математической модели, отображающей связь между выходными переменными системы, параметрами состояния и входными управляющими и возмущающими воздействиями. Сложная система обычно формализуется как детерминированно-стохастическая модель. С позиций системного анализа решаются задачи компьютерного моделирования, оптимизации, управления и оптимального проектирования био, химических и пищевых технологических систем в масштабе цеха, предприятия. Сущность системного подхода состоит в том, что вся информация, получаемая в лабораториях, на опытно-промышленных установках, последовательно накапливается и обогащается в процессе разработки полной математической модели технологической системы, которая затем используется для оптимизации того или иного производства.

Компьютерное моделирование есть процесс конструирования модели реального объекта (системы) и постановки вычислительных экспериментов на этой модели с целью либо понять (исследовать) поведение этой системы, либо оценить различные стратегии (алгоритмы), обеспечивающие функционирование данной системы. Таким образом, процесс компьютерного моделирования включает и конструирование модели, и ее применение для решения поставленной задачи: анализа, исследования, оптимизации или синтеза (проектирования) технологических процессов и оборудования. Все эти задачи чрезвычайно сложны и включают в себя почти бесконечное число элементов, переменных, параметров, ограничений и т.д. Пытаясь построить точную модель, мы могли бы попытаться включить все эти элементы (явления) и потратить уйму времени, собирая мельчайшие факты, касающиеся любой ситуации, и устанавливая связи между ними. Сходство модели с объектом, который она отображает, называется степенью изоморфизма. Для того, чтобы быть изоморфной, модель должна удовлетворять двум условиям: 1) должно существовать однозначное соответствие между элементами модели и элементами представляемого объекта; 2) должны быть сохранены точные соотношения или взаимодействия между элементами.

Степень изоморфизма модели относительна, и большинство моделей скорее гомоморфны, чем изоморфны. Под гомоморфизмом мы понимаем сходство по форме при различии основных структур, причем имеет место лишь поверхностное подобие между различными группами элементов модели и объекта. Гомоморфные модели являются результатом процессов упрощения и абстракции.

Основой успешной методики компьютерного моделирования должна быть тщательная отработка моделей. Обычно, начав с очень простой модели, постепенно продвигаются к более совершенной ее форме, отражающей сложную ситуацию более точно. Аналогии и ассоциации с хорошо построенными структурами, по-видимому, играют важную роль в определении отправной точки этого процесса совершенствования и отработки деталей. Этот процесс совершенствования и отработки связан с учетом постоянного процесса взаимодействия и обратной связи между реальной ситуацией и моделью. Между процессом модификации модели и процессом обработки данных, генерируемых реальным объектом, имеет место непрерывное взаимодействие. Таким образом, искусство моделирования состоит в способности анализировать проблему, выделять из нее путем абстракции ее существенные черты, выбирать и должным образом модифицировать предположения, характеризующие систему, а затем отрабатывать и совершенствовать модель до тех пор, пока она не станет давать полезные для практики результаты.

Разработка и применение компьютерных моделей все еще в большей степени искусство, нежели наука. Следовательно, как и в других видах искусства, успех или неудача определяется не столько методом, сколько тем, как он применяется. Искусством моделирования могут овладеть те, кто обладает оригинальным мышлением, изобретательностью и находчивостью, равно как и глубокими знаниями систем и физических явлений, которые необходимо моделировать.

1 Общие сведения о моделях и компьютерном моделировании

Изучая сложные технологические объекты, процессы, аппараты и физико-химические явления, мы не можем учесть все факторы: какие-то оказываются существенными, а

какими-то можно пренебречь. При этом формируется модель объекта исследования. В процессе компьютерного моделирования исследователь имеет дело с тремя объектами: системой (реальной, проектируемой, воображаемой), математической моделью и программой ЭВМ, реализующей алгоритм решения уравнений модели. Традиционная схема компьютерного моделирования, как единого процесса построения и исследования модели, имеющего соответствующую программную поддержку, может быть представлена в следующем виде (рис. 1.1).

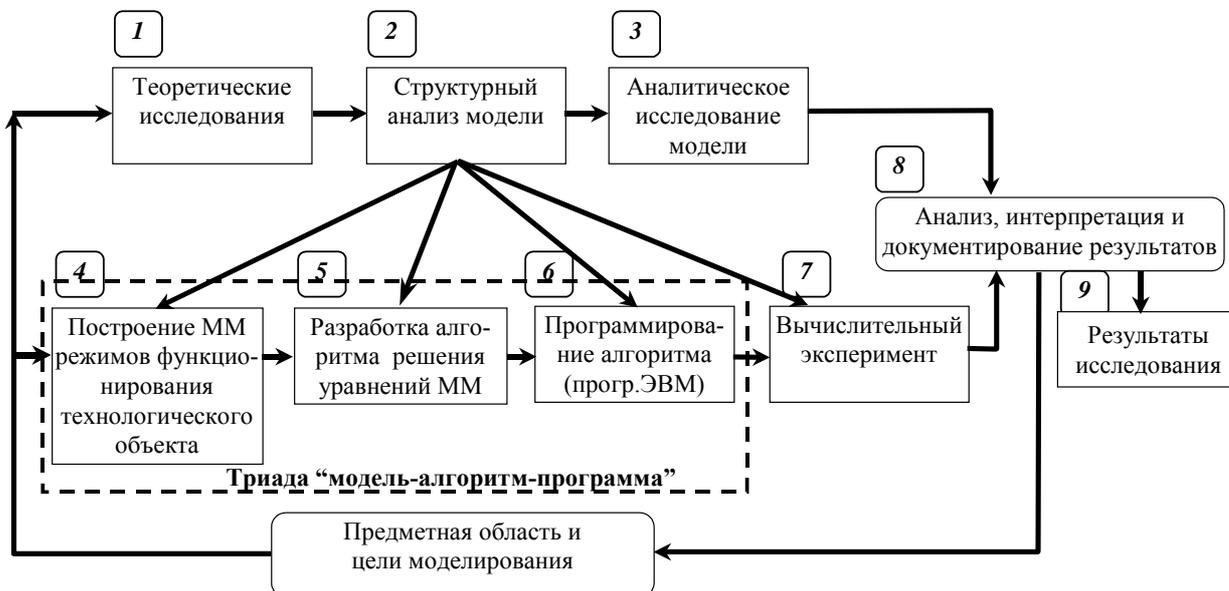


Рис. 1.1 – Схема организации процесса компьютерного моделирования

Исходя из того, что компьютерное моделирование применяется для исследования, оптимизации и проектирования реальных технологических объектов (систем), можно выделить следующие этапы этого процесса:

- 1) определение объекта – установление границ, ограничений и измерителей эффективности функционирования объекта;
- 2) формализация объекта (построение модели) – переход от реального объекта к некоторой логической схеме (абстрагирование);
- 3) подготовка данных – отбор данных, необходимых для построения модели, и представление их в соответствующей форме;
- 4) разработка моделирующего алгоритма и программы ЭВМ;
- 5) оценка адекватности – повышение до приемлемого уровня степени уверенности, с которой можно судить относительно корректности выводов о реальном объекте, полученных на основании обращения к модели;
- 6) стратегическое планирование – планирование вычислительного эксперимента, который должен дать необходимую информацию;
- 7) тактическое планирование – определение способа проведения каждой серии испытаний, предусмотренных планом эксперимента;
- 8) экспериментирование – процесс осуществления имитации с целью получения желаемых данных и анализа чувствительности;
- 9) интерпретация – построение выводов по данным, полученным путем имитации;
- 10) реализация – практическое использование модели и результатов моделирования;
- 11) документирование – регистрация хода осуществления процесса и его результатов, а также документирование процесса создания и использования модели.

Перечисленные этапы создания и использования модели определены в предположении, что задача может быть решена наилучшим образом с помощью компьютерного моделирования. Однако, это может быть не самый эффективный способ. В том случае, если задача может быть сведена к простой модели и решена *аналитически* нет никакой нужды в компьютерном моделировании и имитации. Следует изыскивать все возможные средства, подходящие для решения данной конкретной задачи, стремясь при

этом к оптимальному сочетанию стоимости и желаемых результатов. Прежде чем приступить к оценке возможностей имитации, следует самому убедиться, что простая аналитическая модель для данного случая не пригодна.

Методология компьютерного моделирования

В представленной на рис. 1.1 схеме организации процесса компьютерного моделирования (имитации) основная цепочка (реальный технологический объект (система) – математическая модель – моделирующий алгоритм – программа ЭВМ – вычислительный эксперимент) соответствует традиционной схеме, но во главу угла теперь ставится понятие триады: *модель – алгоритм – программа* (блоки 4, 5, 6), стратегическое и тактическое планирование вычислительного эксперимента (блок 7), интерпретация и документирование его результатов (блок 8).

На первом этапе построения ММ выбирается (или строится) «эквивалент» технологического объекта, отражающий в математической форме важнейшие его свойства – законы, которым он подчиняется, связи, присущие составляющим его элементам, и т.д. Математическая модель (или ее фрагменты) исследуется теоретическими методами, что позволяет получить важные предварительные знания об объекте.

Второй этап связан с разработкой метода расчета сформулированной математической задачи, или, как говорят, вычислительного или моделирующего алгоритма. Фактически он представляет собой совокупности алгебраических формул, по которым ведутся вычисления, и логических условий, позволяющих установить нужную последовательность применения этих формул. Вычислительные алгоритмы должны не исказить основные свойства модели и, следовательно, исходного технологического объекта, быть экономичными и адаптирующимися к особенностям решаемых задач и используемых компьютеров.

Как правило, для одной и той же математической задачи можно предложить множество вычислительных алгоритмов. Однако, требуется построение эффективных вычислительных методов, которые позволяют получить решение поставленной задачи с заданной точностью за минимальное количество действий (арифметических, логических), то есть с минимальными затратами машинного времени. Эти вопросы весьма существенны и составляют предмет теории численных методов.

Вычислительный эксперимент имеет "многовариантный" характер. Действительно, решение любой прикладной задачи зависит от многочисленных входных переменных и параметров. Например, если рассчитывается химико-технологическая установка, то имеется множество различных режимных переменных и конструктивных параметров, среди которых нужно определить их оптимальный набор, обеспечивающий эффективное функционирование этой установки. Получить решение соответствующей математической задачи в виде формулы, содержащей явную зависимость от режимных переменных и конструктивных параметров, для реальных задач, как говорилось выше, не удастся. При проведении вычислительного эксперимента каждый конкретный расчет проводится при фиксированных значениях переменных и параметров. Проектируя оптимальную установку, то есть, определяя в пространстве переменных и параметров точку, соответствующую оптимальному режиму, приходится проводить большое число расчетов однотипных вариантов задачи, отличающихся значениями некоторых переменных или параметров. Поэтому очень важно опираться на эффективные численные методы.

Третий этап – создание программы для реализации разработанного моделирующего алгоритма на ЭВМ (создание компьютерной модели). Применение языков программирования СИ++, Паскаль и других порождает ряд проблем, из которых главными являются трудоемкость и недостаточная гибкость. В процессе исследования реальных систем часто приходится уточнять модели, что влечет за собой перепрограммирование моделирующего алгоритма. Ясно, что процесс моделирования в этом случае не будет эффективным, если не обеспечить его гибкости. Для этой цели можно использовать формальные схемы, описывающие классы математических моделей из определенной предметной области, поскольку программировать тогда нужно функционирование данной схемы, а не описываемые ею частные модели.

Создав *триаду* «модель – алгоритм – программа», исследователь получает в руки универсальный, гибкий и сравнительно недорогой инструмент, который вначале отлаживается, тестируется в «пробных» вычислительных экспериментах. После того как *адекватность* триады исходному технологическому объекту удостоверена, с моделью можно проводить разнообразные «опыты», дающие все требуемые качественные и количественные свойства и характеристики объекта. Процесс компьютерного моделирования сопровождается улучшением и уточнением, по мере необходимости, всех звеньев триады.

Обратимся теперь к блоку 7. Вычислительный эксперимент – это собственно проведение расчетов на ЭВМ и получение информации, представляющей интерес для исследователя. Конечно, точность этой информации определяется достоверностью, прежде всего модели, моделирующего алгоритма и программы ЭВМ. Именно по этой причине в серьезных прикладных исследованиях нигде не начинают вести полномасштабные расчеты сразу же по только что написанной программе. Им всегда предшествует период проведения тестовых расчетов. Они необходимы не только для того, чтобы "отладить" программу, то есть отыскать и исправить все ошибки и опечатки, допущенные как при создании алгоритма, так и при его программной реализации. В этих предварительных расчетах тестируется также сама математическая модель, выясняется ее адекватность исследуемому объекту. Для этого проводится расчет некоторых контрольных экспериментов, по которым имеются достаточно надежные измерения. Сопоставление этих данных с результатами расчетов позволяет уточнить математическую модель, обрести уверенность в правильности предсказаний, которые будут получены с ее помощью.

Только после проведения длительной кропотливой работы в вычислительном эксперименте наступает фаза прогноза (имитации) — с помощью компьютерной модели предсказывается поведение исследуемого объекта в условиях, где натурные эксперименты пока не проводились или где они вообще невозможны.

Важное место в вычислительном эксперименте занимает обработка результатов расчетов, их всесторонний анализ и, наконец, выводы. Эти выводы бывают в основном двух типов: или становится ясна необходимость уточнения модели, или результаты, пройдя проверку, передаются заказчику. При оптимизации или проектировании технологического объекта из-за сложности и высокой размерности математической модели проведение расчетов по описанной выше схеме может оказаться чересчур дорогим. И здесь идут на упрощение модели, на построение своего рода инженерных методик (формул), но опирающихся на сложные модели и расчеты и дающих возможность получить необходимую информацию значительно более дешевым способом. При этом проводится огромная предварительная работа по анализу сложных моделей, квинтэссенцией которой и являются простые на первый взгляд формулы.

При массовом использовании методов компьютерного моделирования в технических проектах следует добиваться резкого сокращения сроков разработки моделей, обеспечивающих различные этапы проектирования. Решение этой задачи возможно при соответствующем уровне развития технологии компьютерного моделирования.

Технология компьютерного моделирования является основой целенаправленной деятельности, смысл которой состоит в обеспечении возможности фактического эффективного выполнения на ЭВМ исследований функционирования сложных систем. С ее помощью организуются действия исследователя на всех этапах его работы с моделями, начиная от изучения предметной области и выделения моделируемой проблемной ситуации и кончая построением и реализацией компьютерных экспериментов для анализа поведения системы.

Говоря о технологии моделирования, следует отметить два важных аспекта:

1) методологическую составляющую технологии как науки, занимающейся выявлением закономерностей, применение которых на практике позволяет находить наиболее эффективные и экономичные приемы компьютерного моделирования объектов (систем) на ЭВМ;

2) прикладные цели и задачи технологии как искусства, мастерства, умения достигать в ходе компьютерного моделирования сложных объектов практически полезных результатов.