

Системный анализ, управление и автоматизация

УДК 620.193

ЭКВИВАЛЕНТНЫЕ СХЕМЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ПРОЦЕССОВ ДЛЯ ФОРМАЛИЗАЦИИ МЕХАНИЗМОВ ПРОТЕКАНИЯ ПРОМЫШЛЕННЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

С.Б. Коныгин

Самарский государственный технический университет
443100, г. Самара, ул. Молодогвардейская, 244

Рассмотрены вопросы формализации механизмов протекания промышленных технологий. Предложены эквивалентные схемы некоторых физико-химических процессов.

Ключевые слова: *промышленные технологии, физико-химические процессы, эквивалентные схемы.*

В настоящее время проведение инженерных расчетов связано с широким применением компьютерного моделирования, в особенности использующего визуальное проектирование различных технических объектов и процессов. Одной из проблем, которые возникают при построении моделей промышленных технологий, основанных на протекании сложных физико-химических процессов, является ограниченность подходов к формализации механизмов их протекания [1].

В этой связи для решения указанной проблемы в настоящей работе предлагается использовать эквивалентные схемы элементарных процессов (ЭСЭП). В качестве структурных элементов ЭСЭП выделены два класса объектов: частицы и процессы. На основании анализа механизмов протекания атомно-молекулярных процессов между ними выделены два типа структурных связей:

- участие частиц в процессах;
- воздействие соседних частиц на реализацию процессов.

Для визуального представления ЭСЭП были разработаны условные графические обозначения (табл. 1). В качестве прообраза при построении ЭСЭП были использованы сети Петри [2]. При построении ЭСЭП считается, что рассматриваемый объект на микроуровне состоит из равномерной сетки ячеек, в которых, в свою очередь, располагаются молекулы или атомы [3].

В результате проведенного анализа современных физических представлений о механизмах протекания процессов на атомно-молекулярном уровне был сформирован базис из наиболее часто используемых структурных элементов для построения ЭСЭП (табл. 2).

С помощью разработанного базиса возможна формализация механизмов широкого класса промышленных технологий. Каждая из получаемых ЭСЭП представляет самостоятельный интерес и требует проведения отдельного исследования.

В рамках проведенной классификации, основанной на типе поведения межфазной границы, были выделены характерные классы ЭСЭП, присутствующие в ряде промышленных технологий:

- системы с равнодоступной поверхностью;
- системы с динамической поверхностью;
- однофазные системы (без границы раздела фаз).

Схемы ЭСЭП для типичных представителей первых двух классов приведены на рис. 1.

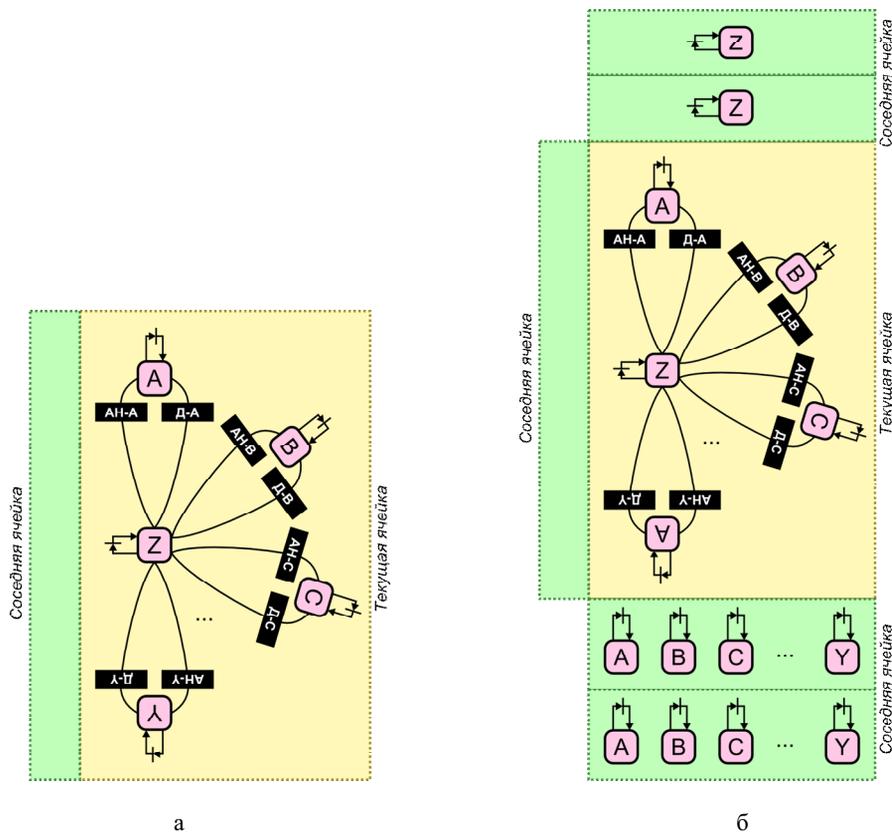
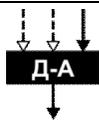


Рис. 1. ЭСЭП с равнодоступной (а) и динамической (б) поверхностью

Таблица 1

Условные графические обозначения, принятые при описании ЭСЭП

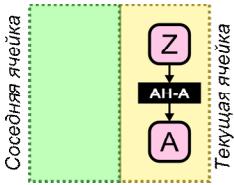
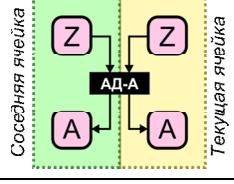
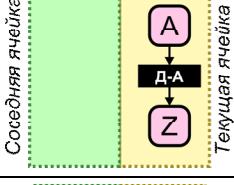
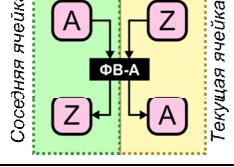
Условное обозначение	Описание
	<p>Цветовые поля обозначают принадлежность состояний к текущей или соседней ячейкам. Для сложных процессов, в которых участвуют более двух частиц, в схеме может быть представлено несколько соседних ячеек.</p>
	<p>Текущие состояния ячеек. Буква обозначает тип частицы, находящейся в ячейке и соответствующей данному состоянию.</p>

Условное обозначение	Описание
	Физико-химический процесс. Буквенные обозначения строятся по схеме: первая буква – процесс, вторая (необязательная) буква – механизм, буквы после дефиса – участвующие частицы.
	Нулевой процесс, при котором ячейка не изменяет своего состояния.
	Стрелки, входящие в процесс, показывают условия (состояния ячеек), при которых возможна его реализация. Стрелки, выходящие из процесса, показывают конечные состояния ячеек в случае его реализации.
	Пунктирные стрелки показывают влияние состояний соседних ячеек на параметры процесса в текущей ячейке.

Приведенные на рис. 1 ЭСЭП отражают адсорбционно-десорбционное взаимодействие поверхности с многокомпонентной газовой фазой.

Таблица 2

Базовые элементы ЭСЭП, соответствующие модулям элементарных физико-химических процессов

Элемент схемы	Описание
	<i>Недиссоциативная адсорбция</i> Свободная поверхностная ячейка переходит из пустого состояния Z в содержащее частицу состояние A
	<i>Диссоциативная адсорбция</i> Две свободные поверхностные ячейки переходят из пустых состояний Z в содержащие частицы состояния A
	<i>Десорбция</i> Поверхностная ячейка переходит из состояния с частицей A в свободное состояние Z
	<i>Вакансионная диффузия</i> Состояние с частицей A переходит в одну из соседних свободных ячеек с состоянием Z

Элемент схемы	Описание
	<p><i>Обменная диффузия</i></p> <p>Две соседних ячейки обмениваются состояниями <i>A</i> и <i>B</i></p>
	<p><i>Химическая реакция соединения</i></p> <p>Две соседние ячейки с частицами-реагентами <i>A</i> и <i>B</i> переходят в состояние с частицей-продуктом <i>C</i></p>
	<p><i>Химическая реакция разложения</i></p> <p>Две соседние ячейки с исходной частицей <i>C</i> переходят в состояния частиц-продуктов <i>A</i> и <i>B</i></p>

Пример более сложного варианта ЭСЭП, который может представлять интерес при анализе работы реакционного оборудования химической и нефтегазовой промышленности, приведен на рис. 2. Он отражает химический процесс, протекающий на поверхности катализатора, который, в свою очередь, может отравляться молекулами каталитического яда, адсорбирующимися из газовой фазы.

Особый интерес предложенные ЭСЭП представляют при разработке различных программных продуктов, предназначенных для моделирования технологических процессов различной отраслевой направленности. С помощью указанных эквивалентных схем пользователь продукта может визуальнo конструировать физико-химические механизмы протекания промышленных технологий, учитывающие компонентный состав, совокупность протекающих в них физико-химических процессов и взаимовлияний между ними.

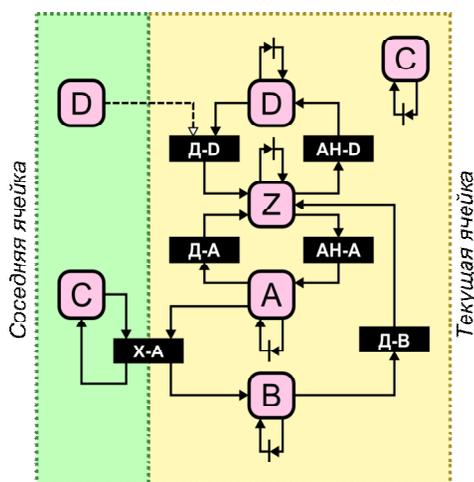


Рис. 2. ЭСЭП гетерогенной каталитической реакции $A \rightarrow B$, осложненной процессами дезактивации поверхности катализатора (*C* – частица катализатора, *D* – молекула каталитического яда)

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Коньгин С.Б.* Программа для поддержки принятия решений о структуре моделей физико-химических систем // Программные продукты и системы. – 2011. – №3. – С. 140-143.
2. *Лескин А.А., Мальцев П.А., Стиридонов А.М.* Сети Петри в моделировании и управлении. – Л.: Наука, 1989. – 133 с.: ил.
3. *Агафонов А.Н., Волков А.В., Коньгин С.Б., Саноян А.Г.* Разработка физических принципов и алгоритмов компьютерного моделирования базовых процессов формирования микроструктур методами вероятностного клеточного автомата // Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Физико-математические науки, 2007. – №1. – С. 99-107.

Статья поступила в редакцию 14 января 2013 г.

EQUIVALENT CIRCUITS OF ELEMENTARY PROCESSES FOR MECHANISMS OF INDUSTRIAL TECHNOLOGIES FORMALIZATION

S.B. Konygin

Samara State Technical University
244, Molodogvardeyskaya st., Samara, 443100

Questions of industrial technologies formalization are considered. The equivalent circuits of some physicochemical processes are offered.

Keywords: *industrial technologies, physicochemical processes, equivalent circuits.*

Sergey B. Konygin (Dr. Sci. (Techn.)), Head of the Machines and Apparatus of Chemical Manufactures Department.