

# 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.

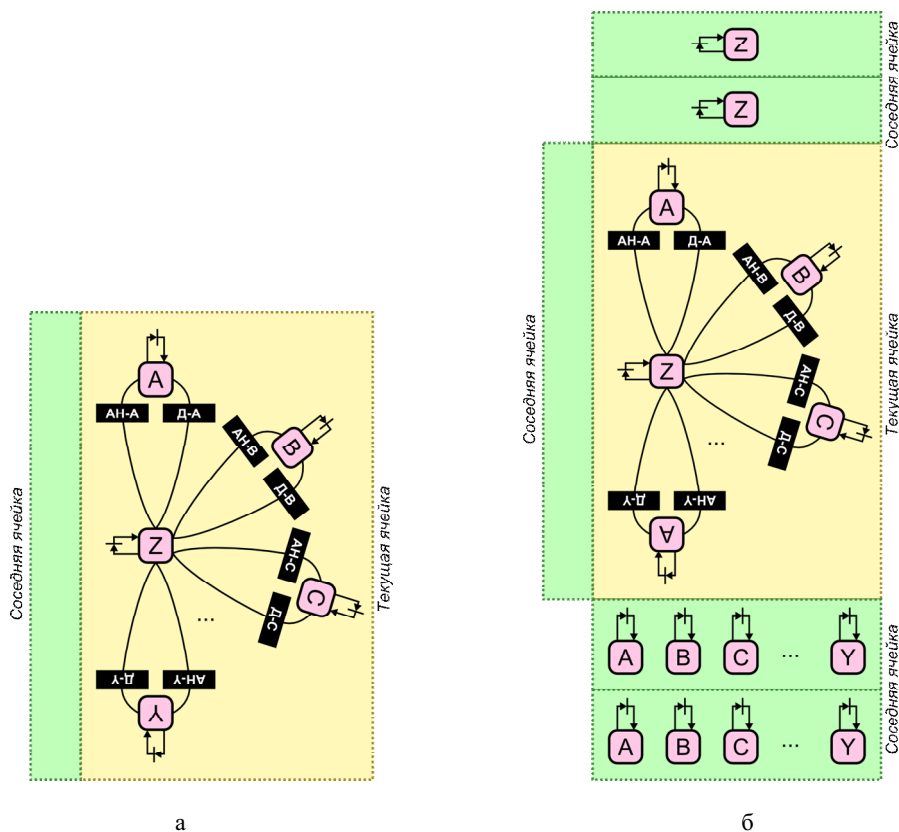
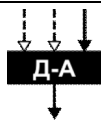





Рис. 1. ЭСЭП с равнодоступной (а) и динамической (б) поверхностью

Таблица 1

**Условные графические обозначения, принятые при описании ЭСЭП**

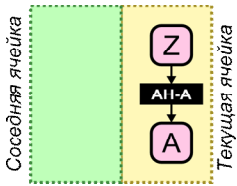
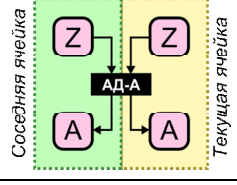
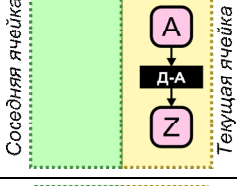
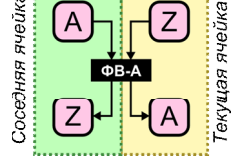
Условное обозначение	Описание
	<p>Цветовые поля обозначают принадлежность состояний к текущей или соседней ячейкам. Для сложных процессов, в которых участвуют более двух частиц, в схеме может быть представлено несколько соседних ячеек.</p>
	<p>Текущие состояния ячеек. Буква обозначает тип частицы, находящейся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

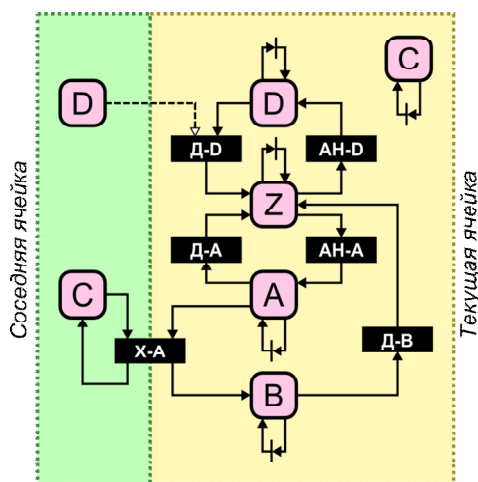


Рис. 2. ЭСЭП гетерогенной каталитической реакции  $A \rightarrow B$ , осложненной процессами дезактивации поверхности катализатора ( $C$  – частица катализатора,  $D$  – молекула каталитического яда)

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Коныгин 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.*